
Interferometrische Bestimmung von absoluten Kugelradiustopografien

Von der Fakultät für Elektrotechnik, Informationstechnik, Physik
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina

zu Braunschweig

zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften

(Dr. rer. nat.)

genehmigte

Dissertation

von Guido Bartl
aus Osnabrück



1. Referent: Prof. Dr. Andreas Hangleiter

2. Referent: Prof. Dr.-Ing. Rainer Tutsch

eingereicht am: 27.10.2009

mündliche Prüfung (Disputation) am: 22.01.2010

(Druckjahr: 2010)

Vorveröffentlichungen der Dissertation

Teilergebnisse aus dieser Arbeit wurden mit Genehmigung der Fakultät für Elektrotechnik, Informationstechnik, Physik, vertreten durch die Mentorin oder den Mentor/die Betreuerin oder den Betreuer der Arbeit, in folgenden Beiträgen vorab veröffentlicht:

Publikationen

- R. A. Nicolaus, G. Bartl: *Influence of the optical quality of the interferometer optics on the diameter measurement of the Avogadro silicon sphere*, Conf. Precision Electromagn. Meas. Dig. (2008), 412-413
- G. Bartl, R. A. Nicolaus: *Einfluss des optischen Systems auf interferometrische Durchmesserbestimmungen von Silizium-Präzisionskugeln für das Avogadro-Projekt*, Proceedings zur 109. DGaO-Tagung (2008), ISSN 1614-8436, http://www.dgao-proceedings.de/download/109/109_h3.pdf
- G. Bartl, R. A. Nicolaus: *Investigations on Diameter Measurements of the Avogadro Silicon Sphere Dependent on the Position in the Field of View of the Interferometer Optics*, IEEE Trans. Instrum. Meas. 58 (2009), 919-923
- G. Bartl, A. Nicolaus: *Influence of the distribution of measuring points on the mean diameter determination of the Avogadro project's silicon spheres*, Meas. Sci. Technol. 20 (2009), 065104 (6pp), DOI 10.1088/0957-0233/20/6/065104
- G. Bartl, A. Nicolaus, E. Kessler, R. Schödel, P. Becker: *The coefficient of thermal expansion of highly enriched ^{28}Si* , Metrologia 46 (2009), 416-422, DOI 10.1088/0026-1394/46/5/005
- G. Bartl, A. Nicolaus: *Extending the capabilities of the sphere interferometer of PTB by a stitching procedure*, FRINGE '09 Proceedings (2009), 354-357, editors: W. Osten, M. Kujawinska

Tagungsbeiträge

- G. Bartl, A. Nicolaus: *Influence of the optical quality of the interferometer optics on the diameter measurement of the Avogadro silicon sphere* (Poster), Conference on Precision Electromagnetic Measurements, Broomfield, USA (2008)
- G. Bartl, A. Nicolaus: *Einfluss des optischen Systems auf interferometrische Durchmesserbestimmungen von Silizium-Präzisionskugeln für das Avogadro-Projekt* (Hauptvortrag), 109. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für angewandte Optik (DGaO), Esslingen (2008)
- G. Bartl, A. Nicolaus, M. Krystek: *Extending the capabilities of the sphere interferometer of PTB by a stitching procedure* (Poster), FRINGE '09, Nürtingen (2009)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	5
2.1	Vielstrahlinterferometrie	5
2.2	Phasenauswertung von Vielstrahlinterferenzen	7
2.3	Prinzip der Durchmesserbestimmung	9
3	Das Kugelinterferometer	11
3.1	Beschreibung des Aufbaus	11
3.1.1	Interferometerkern	11
3.1.2	Vakuumkammer und Temperaturkontrolle	12
3.1.3	Komponenten im Strahlengang	12
3.1.4	Feinjustierung der optischen Komponenten	13
3.1.5	Positioniereinheit der Kugel	14
3.1.6	Laserstabilisierung und Schrittweitensteuerung	15
3.2	Ablauf der Durchmessermessungen	16
3.3	Durchmesserauswertung	18
3.4	Koordinatenzuordnung der Messwerte	22
3.5	Ansätze zur Volumenberechnung	25
3.5.1	Fit mit Kugelflächenfunktionen	26
3.5.2	Gittersortierung	29
3.6	Ergebnisse der Durchmesserauswertung	32
4	Charakterisierung der Messgenauigkeit	37
4.1	Unsicherheitsbetrachtung und Reproduzierbarkeit	37
4.1.1	Unsicherheitsbudget	37
4.1.2	Messungen zur Reproduzierbarkeit	40
4.2	Einfluss der Messpunktverteilung auf den mittleren Durchmesser	42
4.2.1	Untersuchung mit gemessenen Topografien	43

4.2.2	Untersuchung mit simulierten Topografien	45
4.3	Einfluss der Position im Sichtfeld	47
4.3.1	Messungen	48
4.3.2	Ergebnisse und Diskussion	49
5	Bestimmung von Radiustopografien	53
5.1	Einführung	53
5.2	Modell und mathematische Grundlage	54
5.2.1	Parametrisierung mit Kugelflächenfunktionen	56
5.2.2	Alternative mit Rekonstruktionspunkten	60
5.2.3	„Least squares“-Lösung und Unsicherheitsbetrachtung	62
5.3	Validierung mit simulierten Daten	64
5.3.1	Erzeugen der simulierten Messung	65
5.3.2	Ideale Rekonstruktion	66
5.3.3	Einfluss des Überlappbereichs	68
5.3.4	Einfluss der Parameteranzahl	71
5.3.5	Einfluss von Fehleranteilen	73
5.4	Radiustopografien der gemessenen Kugeln	74
5.4.1	Vorüberlegungen	75
5.4.2	Ergebnisse mit Kugelflächenfunktionen	84
5.4.3	Ergebnisse mit Rekonstruktionspunkten	88
5.4.4	Vergleich mit Rundheitsmessdaten	96
6	Zusammenfassung und Ausblick	101
	Abbildungsverzeichnis	103
	Tabellenverzeichnis	108
	Literaturverzeichnis	109
A	Anhang	123
A.1	Nebenrechnung zur Frequenzdurchstimmung	123
A.2	Lösungsweg zur Koordinatenumrechnung	123
A.3	Temperaturausdehnungskoeffizient von ^{28}Si	126
A.4	Nebenrechnung zu Abschnitt 5.2.1	127

1 Einleitung

„Es ist nicht alles rund, was glänzt.“

Im Jahr 1875 wurde durch die *Convention du Mètre* erstmalig eine Einigung getroffen, über nationale Grenzen hinweg gemeinsame Maßeinheiten zu verwenden, und zu diesem Zweck das *Bureau International des Poids et Mesures* (BIPM) und dessen *Conférence Générale des Poids et Mesures* (CGPM) gegründet. 1889 umfasste die Vereinbarung, die ein Vorläufer des Internationalen Einheitensystem – „Système International d’Unités“ (SI) – ist, nach der 1. CGPM neben den Einheiten „Meter“ und „Sekunde“ eine Definition für die Einheit der Masse, die wie folgt lautet:

Das Kilogramm ist die Einheit der Masse; es ist gleich der Masse des Internationalen Kilogrammprototyps.

Heutzutage ist diese Definition die einzige, die noch in ihrer ursprünglichen Form existiert, nämlich auf der Basis eines seit 1889 in Sèvres, Frankreich, gelagerten Metallzylinders aus einer Platin-Iridium-Legierung. Die im Laufe der Zeit rund 100 hergestellten Kopien, die den nationalen Metrologieinstituten als Primärnormale zur Weitergabe der Masseinheit dienen, wurden in Abständen von einigen Dekaden mit dem Original verglichen [1]. Im zeitlichen Verlauf der gemessenen Massedifferenzen zeigte sich dabei eine mittlere Drift, die zu dem Ergebnis führte, dass der Internationale Kilogrammprototyp im Zeitraum von ca. 100 Jahren ungefähr $50\text{ }\mu\text{g}$ an Masse verloren hat und somit offenbar nicht langzeitstabil ist.

Aus diesem Grund soll ähnlich wie bei der Längeneinheit eine von einem weltweit einzigen Artefakt unabhängige Definition auf der Basis einer Naturkonstanten realisiert werden. Dazu wurden gegen Ende des 20. Jahrhunderts verschiedene Projekte ins Leben gerufen, die eine Neudefinition der Masseinheit zum Ziel haben. Die zum Teil internationalen Bestrebungen befassen sich mit unterschiedlichen fundamentalen Naturkonstanten, von denen eine die Avogadro-Konstante N_A ist. Da ihr Wert von etwa $6,022 \cdot 10^{23}\text{ mol}^{-1}$ die Anzahl von Teilchen (Atome, Moleküle, ...) in einem Mol darstellt, bildet sie eine Verbindung zwischen der atomaren und der makroskopischen Skala. Ein Mol des Kohlenstoffisotops ^{12}C hat die Masse 12 g. Die auf diesem Zusammenhang basierende Idee des Avogadro-Projekts [2, 3, 4] ist es, zunächst N_A mit einer relativen Unsicherheit von weniger als $2 \cdot 10^{-8}$ neu zu bestimmen und den dann gültigen Wert zu fixieren, um schließlich

über die atomare Masseneinheit $m_u = m(^{12}\text{C})/12$ ein genaues Maß für die Einheit der Masse zu erhalten [5]:

$$N_A \cdot m_u = 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{mol}} \quad \Leftrightarrow \quad 1 \text{ kg} = 10^3 \cdot \{N_A\} \cdot m_u . \quad (1.1)$$

Darin ist $\{N_A\}$ der dimensionslose Zahlenwert der Avogadro-Konstanten. Um nicht eine solche große Zahl von Atomen einzeln zählen zu müssen, wird im Avogadro-Projekt ein alternativer Weg – „The Silicon Route“ [6] – beschritten, der auf einem nahezu perfekten Silizium-Einkristall basiert. Über das Verhältnis zwischen einem makroskopischen und einem atomaren Volumen lässt sich die Avogadro-Konstante ausdrücken als

$$N_A = \frac{V_{\text{mol}}}{\frac{a^3}{8}} \quad (1.2)$$

mit dem molaren Volumen von Silizium V_{mol} und der Gitterkonstanten a einer Elementarzelle des Siliziumkristalls, in der sich 8 Atome befinden. Mit

$$V_{\text{mol}} = \frac{M_{\text{Si}}}{\frac{m}{V}} \quad \text{und} \quad a = \sqrt{8} \cdot d_{220} , \quad (1.3)$$

wobei M_{Si} die molare Masse von Silizium ist, m und V Masse und Volumen eines makroskopischen Siliziumkristalls sind und d_{220} der Gitterebenenabstand für die mit den Millerschen Indizes (220) bezeichneten Netzebenen ist, erhält man:

$$N_A = \frac{M_{\text{Si}} \cdot V}{\sqrt{8} \cdot d_{220}^3 \cdot m} . \quad (1.4)$$

Folglich müssen für eine Neubestimmung von N_A die Größen Gitterkonstante [7], Masse [8, 9], molare Masse [10] und Volumen gemessen werden. Für eine genaue Bestimmung von Masse und Volumen ist außerdem die Kenntnis der auf der Kristalloberfläche vorhandenen Oxidschicht notwendig [11]. Die benötigten relativen Messunsicherheiten sind $0,3 \cdot 10^{-8}$ für die Gitterkonstante, $0,5 \cdot 10^{-8}$ für die Masse und $1 \cdot 10^{-8}$ für molare Masse, Volumen und Oxidschichtdicke. Zur Überprüfung der Homogenität des Kristallmaterials wird zusätzlich die Dichte [12, 13, 14] gemessen, die auch als Vorinformation für die Volumenbestimmung nötig ist.

Aus praktischen Gründen ist für den makroskopischen Kristall die Kugelform gewählt worden. Die 1 kg schweren und im Durchmesser rund 94 mm großen Siliziumkugeln (Beispiel in Abbildung 1.1) wurden in der *Commonwealth Scientific and Industrial Research Organisation* (CSIRO) in Australien mit einer Oberfläche von optischer Qualität hergestellt [15]. Die Sphärizitätsabweichungen betragen nur einige zehn Nanometer.

Um das Volumen dieser Siliziumkugeln über die absolute Bestimmung des Durchmessers mit der benötigten Unsicherheit von weniger als einem Nanometer ermitteln zu können,

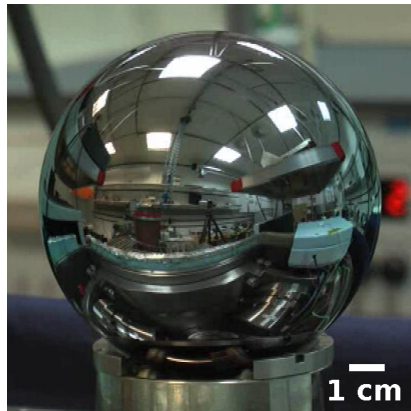


Abbildung 1.1: Eine der im Durchmesser rund 94 mm großen Siliziumkugeln des Avogadro-Projekts

wurden am *National Metrology Institute of Japan* (NMIJ) [16, 17, 18], am CSIRO [19, 20] und in der *Physikalisch-Technischen Bundesanstalt* (PTB) spezielle Interferometeraufbauten entwickelt. Deren Grundidee stammt von dem in [21] vorgestellten Interferometertyp ab und wird in Kapitel 3 erläutert. Das Kugelinterferometer der PTB [22, 23] ist ein Fizeau-Interferometer und unterscheidet sich von den anderen beiden Varianten in erster Linie darin, dass die Durchmesserbestimmung nicht nur punktwise, sondern flächig innerhalb eines Sichtfeldöffnungswinkels von 60° erfolgen kann, weil die Fizeau-Anordnung keine ebenen, sondern sphärische Referenzflächen enthält. Aus diesem Grund ist es damit möglich, ganze Kugeltopografien aus den gemessenen Segmenten zusammenzusetzen. Bisher handelte es sich bei den Resultaten ausschließlich um Durchmesser- und Formtopografien, in denen die topografische Information von gegenüber liegenden Seiten der Kugel ununterscheidbar vermischt wurde.

In der vorliegenden Arbeit wird ein Verfahren vorgestellt, das es erlaubt, mit dem Kugelinterferometer die eigentliche Form der Kugel – also eine echte Radiustopografie – zu rekonstruieren und nicht nur die bei herkömmlichen Rundheitsmessungen [15] ermittelten relativen Formabweichungen, sondern absolute Radien anzugeben. Dadurch wird die Einsatzmöglichkeit des Kugelinterferometers auf Bereiche erweitert, in denen nicht ein Kugelvolumen oder -durchmesser, sondern eine richtungsabhängige Radiusinformation gefragt ist. Dies trifft zum Beispiel auf die Antast- oder Referenzkugeln von Koordinatenmessgeräten zu. Beim Einmessen des Tasters wird die bei der Messung wirksame Geometrie der Antastkugel an Hand einer Referenzkugel ermittelt [24, 25]. Die Abmessung und die Formabweichungen der Referenzkugel müssen zu diesem Zweck möglichst genau kalibriert sein. Eine präzise Vorkenntnis der Kugelgeometrie kann hierbei zur Verbesserung der Messergebnisse beitragen. In einem anderen Beispiel enthält das Messunsicherheitsbudget eines in der PTB entwickelten laserinterferometrischen Trackingsystems einen Unsicherheitsbeitrag von 17,5 %, der nur auf die Formabweichungen der verwendeten Referenzkugel zurückzuführen ist [26]. Eine genauere Spezifizierung der Formab-

weichungen schafft gegebenenfalls die Voraussetzung für eine Reduzierung dieses Unsicherheitsbeitrags. Für das Avogadro-Projekt selbst sind solche Radiustopografien von Interesse, wenn es darum geht, geeignete Positionen auf der Siliziumkugel zu identifizieren, an denen Vergleichsmessungen mit den verschiedenen Interferometern von NMJJ, CSIRO und PTB durchgeführt werden können.

Nach einer im folgenden Kapitel enthaltenen Einführung in die theoretischen Grundlagen des am Kugelinterferometer verwendeten Vielstrahlinterferometrieprinzips, werden in Kapitel 3 das Interferometer selbst und alle nötigen Details zum Prinzip der Messungen und der Datenauswertung vorgestellt. Das anschließende Kapitel befasst sich mit der Charakterisierung der Messgenauigkeit, indem eine Unsicherheitsbetrachtung und die Ergebnisse von Untersuchungen, die die Genauigkeit des Messverfahrens betreffen, aufgeführt werden. Kapitel 5 schließlich führt das Verfahren zur Ermittlung der Radiustopografien ein. Dazu werden zwei zu Grunde liegende mathematische Modellvarianten erläutert, an Hand von simulierten Datensätzen validiert und auf real gemessene Daten angewendet. Der abschließende Vergleich mit Ergebnissen von Rundheitsmessungen ermöglicht eine von den Kugelinterferometerdaten unabhängige Überprüfung des Verfahrens.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Vielstrahlinterferometrie

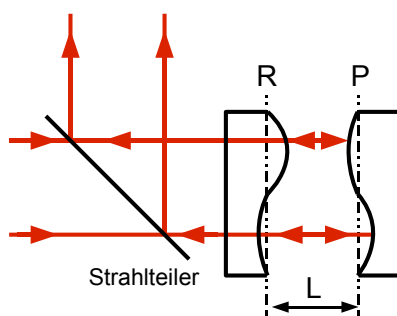


Abbildung 2.1: Schema für eine Fizeau-Anordnung

Ein verbreitetes Einsatzgebiet der Vielstrahlinterferometrie – also das Überlagern von mehr als nur zwei kohärenten Lichtstrahlen wie z. B. im Michelson-Interferometer – ist die Messung der Form optischer Oberflächen (z. B. Linsen, Spiegel, ...). Ein Vorteil gegenüber der Zweistrahlinterferometrie ist dabei der bessere Streifenkontrast, wenn die Reflektivität der Spiegelflächen hoch ist. Die geläufigsten Interferometertypen für Vielstrahlinterferenzen sind das Fabry-Pérot- und das Fizeau-Interferometer. Beide Varianten bestehen aus zwei sich gegenüber liegenden, (teil-)reflektierenden Spiegeln, so dass sich ein Resonator oder Etalon ergibt. Durch konstruktive und destruktive Interferenz der mehrfach reflektierten Teilstrahlen kommt es dazu, dass sich für Wellenlängen, von denen die Resonanzbedingung $L = N \cdot \lambda / 2$ (L = Resonatorlänge, λ = Wellenlänge, $N \in \mathbb{N}$) erfüllt wird, in Transmissionsrichtung Intensitätsmaxima finden lassen. In Reflexionsrichtung sind Intensitätsminima die Folge. Fabry-Pérot- und Fizeau-Interferometer unterscheiden sich durch die Tatsache, dass in Letzterem überwiegend die Reflexionsrichtung verwendet wird und die Reflektivität der Spiegel und damit die Anzahl mehrfach reflektierter Strahlen deutlich geringer ist. Dies reduziert den Streifenkontrast im Vergleich zum Fabry-Pérot-Interferometer.

Eine Interferometeranordnung nach dem Fizeau-Prinzip zeichnet sich gegenüber Zweistrahlinterferometeraufbauten zudem dadurch aus, dass nur mit der Fizeau-Anordnung, bei der die Referenzfläche R und die Prüffläche P entgegengesetzt ausgerichtet sind (Abbildung 2.1), eine absolute Bestimmung der Flächenformabweichung ohne Ebenheitsnor-

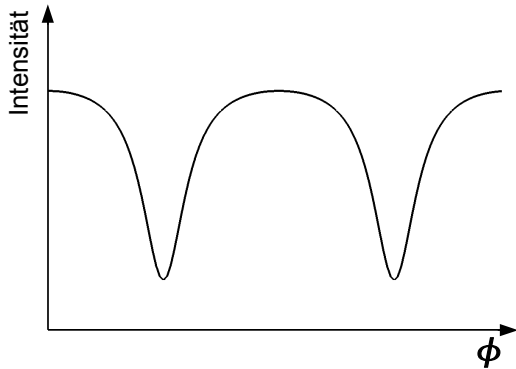


Abbildung 2.2: Exemplarisches Intensitätsprofil einer Vielstrahlinterferenz in Reflexion

mal möglich ist. Der Grund dafür ist, dass sich die Formabweichungen in Bezug auf den mittleren Flächenabstand L beim sogenannten „Drei-Flächen-Test“ [27] über ein Gleichungssystem eindeutig ermitteln lassen. Bei einer Michelson-Anordnung liegen wegen der gleichgerichteten Flächen andere Vorzeichenkombinationen vor, die eine eindeutige Lösung verhindern.

Anders als bei der Interferenz von zwei überlagerten kohärenten Lichtstrahlen wie z. B. im Michelson-Interferometer ist das entstehende Intensitätsprofil einer Vielstrahlinterferenz nicht cosinusförmig. Stattdessen folgt es einem Verlauf, der durch die Größe der Reflexionskoeffizienten des Etalons bestimmt ist, in dem die Vielstrahlreflexionen entstehen. Entsprechende Ausdrücke für die Intensitäten in Transmissions- und Reflexionsrichtung wurden zuerst von Airy [28] hergeleitet und sind daher als Airy-Formeln bekannt [29]. Für ein Etalon mit nahezu parallelen Flächen, einer nicht absorbierenden Fläche auf der Eingangsseite und in Reflexionsrichtung betrachtet kann die Abhängigkeit der Intensität I von der Phase ϕ wie folgt ausgedrückt werden [30]:

$$I = A \cdot \left(1 - \frac{B}{1 - C \cdot \cos \phi} \right). \quad (2.1)$$

Darin ist A eine durch experimentelle Gegebenheiten¹ bestimmte Konstante und B und C sind über die Reflexionskoeffizienten r_1 und r_2 definiert:

$$B = \frac{(1 - r_1^2) \cdot (1 - r_2^2)}{1 + r_1^2 r_2^2} \quad \text{und} \quad C = \frac{2 r_1^2 r_2^2}{1 + r_1^2 r_2^2}. \quad (2.2)$$

Ein Beispiel für die Form eines solchen symmetrischen Vielstrahlintensitätsprofils in Reflexionsrichtung ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Je kleiner die Reflexionskoeffizienten sind, desto mehr nähert sich der Verlauf der Cosinusform an, weil bei geringerer Reflexivität auch die Anzahl der interferierenden Lichtstrahlen abnimmt.

¹z. B. Intensität der Lichtquelle, Empfindlichkeit des Detektors, usw.

2.2 Phasenauswertung von Vielstrahlinterferenzen

Eine Möglichkeit der Auswertung von Interferogrammen ist mit den sogenannten Phasenschiebungsverfahren gegeben. Dabei wird eine Folge von Interferogrammen aufgenommen, die sich darin unterscheiden, dass von Aufnahme zu Aufnahme der zu Grunde liegende Phasenunterschied verändert ist. Die Idee dahinter ist, mit den bekannten Phasenschritten und den aufgenommenen Intensitäten ein Gleichungssystem mit ebenso vielen Zeilen wie unbekannten Größen zu erhalten. Für die Auswertung von Zweistrahlinterferenzen sind dann z. B. drei Aufnahmen – und damit zwei Phasenschritte ε – notwendig, um die unbekannten Größen Grundintensität I_0 , Modulation γ_0 und gesuchte Phase ϕ ermitteln zu können [31]:

$$I_{\text{Zweistrahl}} = I_0 \cdot (1 + \gamma_0 \cos \phi) . \quad (2.3)$$

Ist auch die äquidistante Schrittweite nicht bekannt, sind vier Aufnahmen nötig. Eine Übersicht über unterschiedliche Ansätze von Phasenschiebealgorithmen für Zweistrahlinterferenzen ist zum Beispiel in [31] gegeben.

Eine Auswertung der Vielstrahlinterferenzen aus Gleichung (2.1) mit den für Zweistrahlinterferenzen entwickelten Phasenschiebealgorithmen ist mit fehlerhaften Ergebnissen verbunden, die durch die unterschiedlichen Formen der Intensitätsprofile begründet sind [32]. Dies gilt auch noch für den Fall kleiner Reflexionskoeffizienten oder eines modifizierten Zweistrahlalgorithmus, der in [33] vorgestellt wird. Ein in [30] präsentierter Ansatz zeigt stattdessen einen Weg auf, mit dem sich symmetrische Vielstrahlinterferenzen mathematisch unabhängig von der Größe der Reflexionskoeffizienten exakt ohne Näherungen auswerten lassen. Dieser wird im Folgenden kurz beschrieben.

Mit vier Interferogrammen I_1 , I_2 , I_3 und I_4 , die in äquidistanten Phasenabständen von der Größe 2ε aufgenommen wurden, erhält man aus Gleichung (2.1) ein vierzeiliges Gleichungssystem mit den vier Unbekannten A , B , C und ϕ :

$$I_1 = A \cdot \left(1 - \frac{B}{1 - C \cdot \cos(\phi - 3\varepsilon)} \right) \quad (2.4)$$

$$I_2 = A \cdot \left(1 - \frac{B}{1 - C \cdot \cos(\phi - \varepsilon)} \right) \quad (2.5)$$

$$I_3 = A \cdot \left(1 - \frac{B}{1 - C \cdot \cos(\phi + \varepsilon)} \right) \quad (2.6)$$

$$I_4 = A \cdot \left(1 - \frac{B}{1 - C \cdot \cos(\phi + 3\varepsilon)} \right) . \quad (2.7)$$

Die Lösung für die Phase ϕ ist dann durch die Bildung von Differenzen und Quotienten

zwischen den einzelnen Intensitätsgleichungen gegeben durch

$$\tan^2 \phi = \frac{Q}{Q-P} \cdot \tan^2 \varepsilon \quad (2.8)$$

mit

$$P = \frac{4 \cdot \cos^2 \varepsilon - 1}{4 \cdot \cos^2 \varepsilon} \quad \text{und} \quad Q = \frac{(I_1 - I_4) \cdot (I_2 - I_3)}{(I_1 - I_3) \cdot (I_2 - I_4)}. \quad (2.9)$$

Die Tangens-Funktion führt zu einer Mehrdeutigkeit für die Phase im Intervall $[0; 2\pi[$. Für eine eindeutige Zuordnung von ϕ zum richtigen Teilintervall sorgen folgende Randbedingungen [30]:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \phi < \frac{1}{2}\pi && \text{mit } U \leq 0 \wedge V - U \cdot K < 0 \\ \frac{1}{2}\pi &\leq \phi < \pi && \text{mit } U < 0 \wedge V - U \cdot K \geq 0 \\ \pi &\leq \phi < \frac{3}{2}\pi && \text{mit } U \geq 0 \wedge V - U \cdot K > 0 \\ \frac{3}{2}\pi &\leq \phi < 2\pi && \text{mit } U > 0 \wedge V - U \cdot K \leq 0 \end{aligned} \quad (2.10)$$

mit

$$U = (I_1 - I_4) + (I_2 - I_3), \quad (2.11)$$

$$V = (I_2 - I_1) + (I_3 - I_4) \quad (2.12)$$

$$\text{und} \quad K = C \cdot \frac{\sin \varepsilon - \sin 3\varepsilon}{1 - C^2 \cdot \sin \varepsilon \cdot \sin 3\varepsilon}. \quad (2.13)$$

Für eine Phasenschrittgröße von einer viertel Interferenzordnung, also $2\varepsilon = \pi/2$, ergibt sich $P = 1$ und $K = 0$, so dass Gleichung (2.8) die einfache Form

$$\tan^2 \phi = \frac{(I_1 - I_4) \cdot (I_2 - I_3)}{(I_2 - I_1) \cdot (I_3 - I_4)} \quad (2.14)$$

annimmt. Insbesondere muss wegen $K = 0$ die Konstante C nicht bekannt sein, so dass die Werte von r_1 und r_2 unerheblich sind.

Da für diesen Ansatz die Phasenschrittweite exakt $\pi/2$ sein muss, wurden in [34, 35] Untersuchungen durchgeführt, die sich mit dem Einfluss von Phasenschrittfehlern auf die resultierende Phase ϕ befassen. Als Ergebnis wurde ein Weg aufgezeigt, um das Auftreten von Phasenschrittfehlern zu erkennen und deren Einfluss nachträglich zu korrigieren. Zu diesem Zweck ist es lediglich notwendig, zu den bisher vorausgesetzten vier Interferogrammen I_1 bis I_4 eine fünfte Interferenzaufnahme I_5 hinzuzufügen, die sich um einen weiteren Phasenschritt $2\varepsilon = \pi/2$ von I_4 unterscheidet. Neben dem ursprünglich aufgenommenen Datensatz aus den Messungen 1, 2, 3 und 4 erhält man auf diese Weise einen

Sekundärdatensatz aus den Messungen 2, 3, 4 und 5. Ausgewertet werden dann die Phasen $\phi_{1...4}$ und $\phi_{2...5}$:

$$\phi_{1...4} = \arctan \left(\sqrt{\frac{(I_1 - I_4) \cdot (I_2 - I_3)}{(I_2 - I_1) \cdot (I_3 - I_4)}} \right), \quad (2.15)$$

$$\phi_{2...5} = \arctan \left(\sqrt{\frac{(I_2 - I_5) \cdot (I_3 - I_4)}{(I_2 - I_1) \cdot (I_4 - I_5)}} \right). \quad (2.16)$$

Aus dem Verlauf der Differenz $\phi_{2...5} - \phi_{1...4}$ abhängig von $\phi_{1...4}$ lässt sich nach [34] an Hand der Höhe von lokalen Maxima und Minima die Größe eines möglicherweise vorhandenen Schrittfehlers $\delta\varepsilon$ ablesen. Anschließend kann man die Berechnung der Phase mit der korrigierten Schrittgröße $\varepsilon + \delta\varepsilon$ gemäß der allgemeinen Gleichung (2.8) wiederholen oder, wenn nur relative Phaseninformationen wie bei Oberflächentopografien gesucht sind, mit weniger Rechenaufwand die Mittelung $(\phi_{1...4} + \phi_{2...5})/2$ durchführen, wodurch starke phasenabhängige Abweichungen unterdrückt werden.

2.3 Prinzip der Durchmesserbestimmung

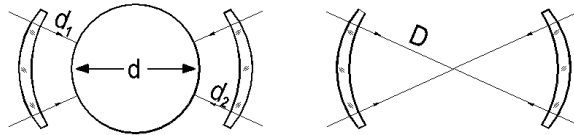


Abbildung 2.3: Schema zum Prinzip der Durchmesserbestimmung mit einem sphärischen Fizeau-Interferometer

$$d = D - d_1 - d_2$$

Die Grundidee der Kugeldurchmesserbestimmung mit einem Interferometer basiert auf der in [21] beschriebenen Methode. Dabei befindet sich die zu vermessende Kugel zwischen zwei Referenzflächen. Während für die Vermessung von Prüflingen mit ebenen Flächen üblicherweise ebene Referenzflächen und Wellenfronten eingesetzt werden, ist es zweckmäßig, im Fall einer Kugel eine sphärische Geometrie zu verwenden. Abbildung 2.3 zeigt das Prinzip eines solchen angepassten Fizeau-Interferometers. Darin befindet sich der Kugelprüfling zwischen zwei Objektiven, die mit ihren integrierten sphärischen Referenzflächen ein sphärisches Etalon bilden. Wenn der Kugelmittelpunkt mit den Krümmungsmittelpunkten der Referenzflächen übereinstimmt, gelangen die von den Objektiven geformten sphärischen Wellenfronten senkrecht auf die Kugeloberfläche bzw. zur gegenüber liegenden Referenzfläche.

Mit diesem Aufbauprinzip lässt sich der Kugeldurchmesser d bestimmen, indem einerseits der Abstand D der Objektiv-Referenzflächen und andererseits die Abstände d_1 und

d_2 zwischen Kugel und Referenzflächen gemessen werden. Man erhält:

$$d = D - d_1 - d_2 . \quad (2.17)$$

Mit dem Kugelinterferometer der PTB wird nur der innerhalb einer Interferenzordnung variierende Teil der Abstände gemessen. Die „fehlenden“ ganzen Interferenzordnungen gehen als Vorinformation aus den Masse- und Dichtemessungen in das Ergebnis ein. Eine Erläuterung dazu folgt in Abschnitt 3.3.

Bei den Prüflingen handelt es sich außerdem nicht um mathematisch exakte Kugeln mit einem einzelnen Durchmesser, sondern es ergeben sich abhängig von den Kugelkoordinaten (ϑ, φ) unterschiedliche Durchmesser $d(\vartheta, \varphi)$, die eine für die jeweilige Kugel charakteristische Topografie darstellen.

Wegen der sphärischen Geometrie lassen sich die für das in Abschnitt 2.2 beschriebene Phasenschiebeverfahren nötigen Phasenschritte nicht durch eine Verschiebung der Referenzflächen realisieren, wie es bei ebenen Flächen üblicherweise der Fall ist. Der Bruchteil einer Interferenzordnung δIO , der zum optischen Weg

$$n_{\text{Luft}} \cdot L = (IO + \delta IO) \cdot \frac{\lambda}{2} \quad (2.18)$$

mit $IO \in \mathbb{N}$ und $0 \leq \delta IO < 1$ gehört, kann demnach nicht über die Variation der Weglänge L , sondern nur über eine Änderung der Luftbrechzahl n_{Luft} oder der Wellenlänge λ verändert werden. Da die zunächst mit kontrollierten Luftdruckänderungen umgesetzte erste Variante [22] auf Grund von mechanischen Deformationen der Objektive nicht genau genug war, wurde das Phasenschiebeverfahren über eine Wellenlängenänderung zu einem späteren Zeitpunkt mit Hilfe eines durchstimmbaren Diodenlasers realisiert [23]. Details dazu werden in Abschnitt 3.1.6 erläutert.

3 Das Kugelinterferometer

3.1 Beschreibung des Aufbaus

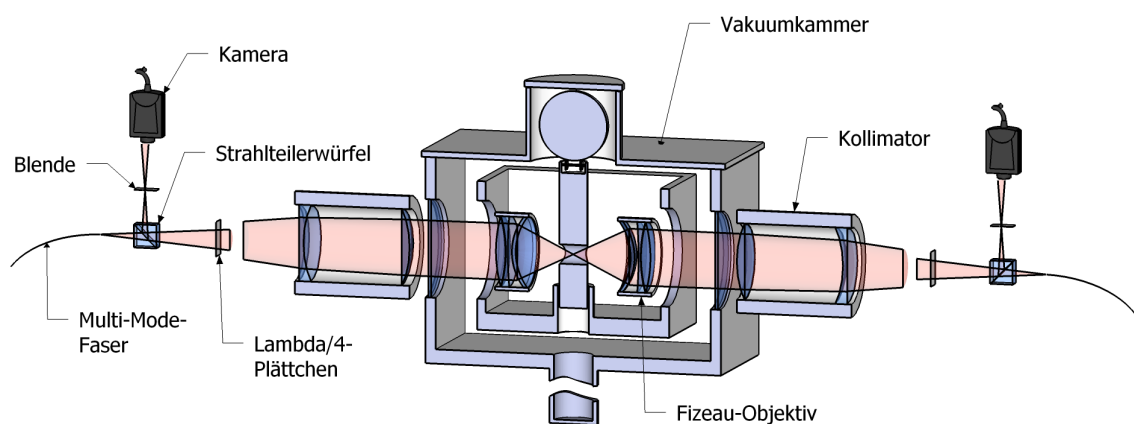


Abbildung 3.1: Schema des Kugelinterferometeraufbaus. Die nicht maßstabsgetreue Skizze stellt den sich über rund 3 m erstreckenden symmetrischen Strahlengang dar. In der Abbildung ist die im Durchmesser rund 10 cm große Kugel aus dem Strahlengang gehoben, so dass sich die beiden Fizeau-Objektive durch das Loch in der Hubstange gegenüber stehen.

Die wesentlichen Komponenten, aus denen das Kugelinterferometer besteht, und der Verlauf des optischen Strahlengangs sind in der schematischen Schnittzeichnung in Abbildung 3.1 dargestellt. Es folgt eine detaillierte Beschreibung der Funktionsweise des gesamten Aufbaus.

3.1.1 Interferometerkern

Das Zentrum des gesamten Aufbaus (Abbildung 3.1) ist durch den Mittelpunkt der zu messenden Kugel definiert, die auf einer Dreipunktauflage liegt, welche wiederum fest mit dem monolithischen Stahlrahmen des Interferometers verbunden ist. Die Dreipunktauflage ist nach einer Finite-Elemente-Simulation so konzipiert, dass eine Verformung der Kugel durch die Schwerkraft für die Messung vernachlässigbar ist. Auf gegenüber liegenden Seiten der Kugel sind zwei Fizeau-Objektive mit sphärischen Referenzflächen kolline-

ar am Stahlrahmen mit Justierschrauben befestigt, so dass im Idealfall die Krümmungsmittelpunkte der Referenzflächen mit dem Mittelpunkt der Kugel übereinstimmen. Dadurch bilden die Objektive ein sphärisches Etalon mit der Kugel in der Mitte. Die Fizeau-Objektive sind vom Typ „F-Aplanar“ aus der Produktpalette der Firma ZEISS, wurden allerdings hinsichtlich der optischen und mechanischen Eigenschaften für den Einsatz im Vakuum bei 20 °C modifiziert. Öffnungsdurchmesser, Krümmungsradius der Referenzflächen und Brennweite betragen 75,5 mm, so dass sich $f/\# = 1,0$ ergibt. Der Öffnungswinkel des gesamten Sichtfelds beträgt 60° mit der numerischen Apertur $NA = 0,5$. Die Qualität der transmittierten Wellenfront ist mit $\lambda/20$ spezifiziert.

3.1.2 Vakuumkammer und Temperaturkontrolle

Der gesamte Interferometerahmen mit Dreipunktauflage und Objektiven befindet sich in einer Vakuumkammer, die Messungen in einem Feinvakuum in der Größenordnung von 0,3 Pa ermöglicht, wodurch der Einfluss der Luftbrechzahl auf das Messergebnis vernachlässigt werden kann. Für die absolute Durchmesserbestimmung ist zusätzlich eine präzise Kontrolle der Temperatur notwendig [36]. Bei einem Kugeldurchmesser von rund 100 mm ergibt eine Temperaturschwankung um z. B. 4 mK eine Längenänderung von 1 nm. Aus diesem Grund ist die Vakuumkammer von einem Röhrensystem umgeben, durch das Wasser fließt, welches von einem Thermostat auf 20 °C stabilisiert wird. Wegen der thermischen Trägheit des Systems aus Vakuumkammer und Interferometerahmen, die nur an drei Auflagepunkten in Kontakt zueinander stehen, bleiben Temperaturschwankungen von lediglich wenigen Millikelvin übrig. Um eine nachträgliche Korrektur der gemessenen Längen auf den Zielwert bei 20 °C zu ermöglichen, muss die Temperatur auf 1 mK genau bestimmt werden. Dazu wird die Temperaturdifferenz zwischen der Kugel und einem Kupferblock, der thermischen Kontakt mit dem Interferometerahmen hat und als Temperaturreferenz dient, mit Hilfe von Thermoelementpaaren gemessen. Diese relative Temperaturmessung ist auf die Temperaturskala ITS-90 [37] zurückgeführt, indem die Temperatur des Kupferblocks mit einem Platin-Widerstand-Thermometer Pt 25, das in Bezug auf Fixpunktzellen¹ kalibriert wurde, absolut ermittelt wird.

3.1.3 Komponenten im Strahlengang

Entlang des optischen Strahlengangs enthält die temperierte Vakuumkammer auf beiden Seiten jeweils ein Glasfenster mit optisch glatten Oberflächen. Das Profil der Fenster ist

¹Für die Kalibrierung wurden eine Wasser-Tripelpunktzelle und eine Gallium-Schmelzpunktzelle verwendet, die den Bereich von 0 °C bis 30 °C auf der Temperaturskala abdecken.

leicht keilförmig, um Reflexionen entlang der optischen Achse zu vermeiden. Außerhalb der Vakuumkammer schließen sich symmetrisch auf beiden Seiten Kollimator-Objektive an, die das aus Multimode-Glasfasern divergent austretende Licht der Laserlichtquelle (Erläuterung folgt in Abschnitt 3.1.6) parallel zur optischen Achse formen. Dabei wird nur der zentrale Bereich des Lichtkegels für eine nahezu homogene Ausleuchtung im Interferometer verwendet. Der Randbereich wird über einen ringförmigen Spiegel seitlich auf einen Fotodetektor zur Intensitätsüberwachung ausgekoppelt. Zwischen Glasfasern und Kollimatoren befinden sich außerdem jeweils ein polarisationsabhängiger Strahlteilerwürfel und ein $\lambda/4$ -Plättchen, wodurch erstens sichergestellt ist, dass kein Licht in Rückwärtsrichtung über den Strahlteiler hinaus gelangen kann, und zweitens nur das Interferenzlicht aus der Interferometerkammer zu den seitlich an den Strahlteilern angeordneten Kameras kommt. Die Kollimatoren sind Spezialanfertigungen, die den Strahlteiler und das $\lambda/4$ -Plättchen in der Optikrechnung bereits berücksichtigen und mit einer nominalen Brennweite von 1600 mm eine kollimierte Wellenfront liefern, die nach Aussage von Messungen mit einem Shack-Hartmann-Sensor [38] besser als $\lambda/40$ ist. Durch die Blende zwischen Kamera und Strahlteilerwürfel werden einerseits Störreflexe blockiert und andererseits die Schärfentiefe vergrößert, weshalb die axiale Position der Kameras nur auf einige Millimeter genau zu sein braucht. Bei den Kameras handelt es sich um das Modell Photometrics CH350, das einen Chip mit $512\text{px} \times 512\text{px}$ (Kürzel „px“ für Pixel) und einer Dynamikauflösung von 16 Bit enthält und durch Peltier-Kühlung auf -40°C ein nur geringes Pixelrauschen aufweist. Die symmetrisch aufgebauten Seiten des Interferometers werden später als Arm 1 und Arm 2 bezeichnet. Wegen des „Common Path“-Prinzips – Hin- und Rückweg des Lichts verlaufen durch die selben Luft- und Glasstrecken – sind der Aufbau und ein damit aufgenommenes Interferogramm auch außerhalb der Vakuumkammer unempfindlich gegenüber Schwankungen (z. B. auf Grund von Temperaturänderungen) der geometrischen Weglänge.

3.1.4 Feinjustierung der optischen Komponenten

Grundsätzlich ist es notwendig, beide Interferometerarme kollinear auszurichten, so dass sich eine gemeinsame optische Achse ergibt. Dies kann erreicht werden, indem alle optischen Komponenten nacheinander so in den ringförmig durch und um das Interferometer verlaufenden Strahlengang eines Hilfslasers eingefügt und ausgerichtet werden, dass die Reflexe der jeweiligen Grenzflächen entlang des Strahlengangs verlaufen. Auch bei eingesetzter Kugel müssen die Reflexe, die von der Kugeloberfläche kommen, auf der optischen Achse bleiben.

Weiterhin müssen die für die Messungen als Lichtquellen eingesetzten Glasfaserenden

korrekt in den Brennpunkten der Kollimatoren positioniert sein. Eine präzise Positionierung ist durch eine Autokollimationsausrichtung realisierbar [39], durch die sichergestellt wird, dass das ins Interferometer gelangende Licht an den Referenzflächen der Fizeau-Objektive oder an der Kugeloberfläche exakt zum Ausgangspunkt zurück reflektiert wird. Die Kameras werden so aufgestellt, dass der kreisförmige Bildausschnitt den Kamerachip nahezu bis zum Rand ausnutzt und bei beiden Kameras auf etwa ein Pixel genau im Bild zentriert ist. Die große Schärfentiefe bietet dabei mehrere Millimeter Toleranz für eine axiale Bewegung der Kameras. Dass die Kameras nicht gegeneinander rotiert sind, wird durch Betrachtung einer im Interferometer platzierten Kante überprüft und ggf. korrigiert.

3.1.5 Positioniereinheit der Kugel

Gemäß Abbildung 2.3 wird der Kugeldurchmesser aus den Ergebnissen von Messungen mit und ohne Kugel ermittelt. Deshalb ist es notwendig, die Kugel in der Vakuumkammer aus dem Strahlengang zu entfernen und diesen zwischen den beiden Fizeau-Objektiven frei zu geben. Zu diesem Zweck befindet sich unterhalb der Dreipunktauflage ein Hubmechanismus, der ebenfalls am Interferometerahmen befestigt ist. Anderenfalls würde der Gewichtsverlust beim Anheben der Kugel dazu führen, dass sich der Interferometerahmen mechanisch verformt und die Objektive eine vom vorherigen Zustand abweichende Position einnehmen. In der Hubstange befindet sich ein Loch, das in der angehobenen Position den Strahlengang zwischen den Objektiven frei gibt. Zusätzlich kann die Kugel in dieser Position um zwei senkrecht zueinander stehende Achsen gedreht werden. Eine vertikale Drehachse ist durch die drehbare Hubstange selbst gegeben. Da die Kugel in der angehobenen Position auf zwei Räderpaaren aus PEEK² gelagert ist, wird durch das Abrollen der Rädchen eine Drehung um eine horizontale Drehachse ermöglicht. Die Winkelposition der Kugel wird aus den Encoder-Zählerständen der Antriebsmotoren ermittelt. Dazu erfolgte zuvor eine Kalibrierung. Für die vertikale Achse wurde die Drehung in 5°-Schritten kalibriert, indem die Winkelabweichung an den Spiegelflächen eines 72-flächigen Polygons mittels eines Autokollimators bis auf einige Winkelminuten genau gemessen wurde. Eine Abweichung von zum Beispiel fünf Winkelminuten entspricht einer tangentialen Abweichung auf der Kugeloberfläche von ungefähr 70 µm (bei einem Kugeldurchmesser von rund 94 mm) und liegt damit deutlich unterhalb der lateralen Auflösung der Kameras von etwa 0,5 mm/px. Die Drehbewegung auf den Rädchen der horizontalen Drehachse ist wegen der verschiedenen Durchmesser von Kugel zu Kugel unterschiedlich.

²Die Verwendung des Materials PEEK (Polyetheretherketon) hat sich als sinnvoll erwiesen, um einerseits keine Beschädigung der Siliziumkugeln zu verursachen und andererseits keine Materialrückstände auf Grund der Abrollbewegung auf der Kugeloberfläche zu hinterlassen.

Die Kalibrierung erfolgt in diesem Fall darüber, dass eine Markierung auf der Kugel mit einer Markierung an einem Fenster im Deckel der Vakuumkammer zur Deckung gebracht wird und beide Markierungen nach einer 360°-Drehung erneut übereinstimmen müssen. Kleinere Drehungsschritte werden als entsprechende Encoder-Zählerstände rechnerisch ermittelt, wobei die Positioniergenauigkeit ebenfalls besser als die Kameraauflösung ist.

3.1.6 Laserstabilisierung und Schrittweitensteuerung

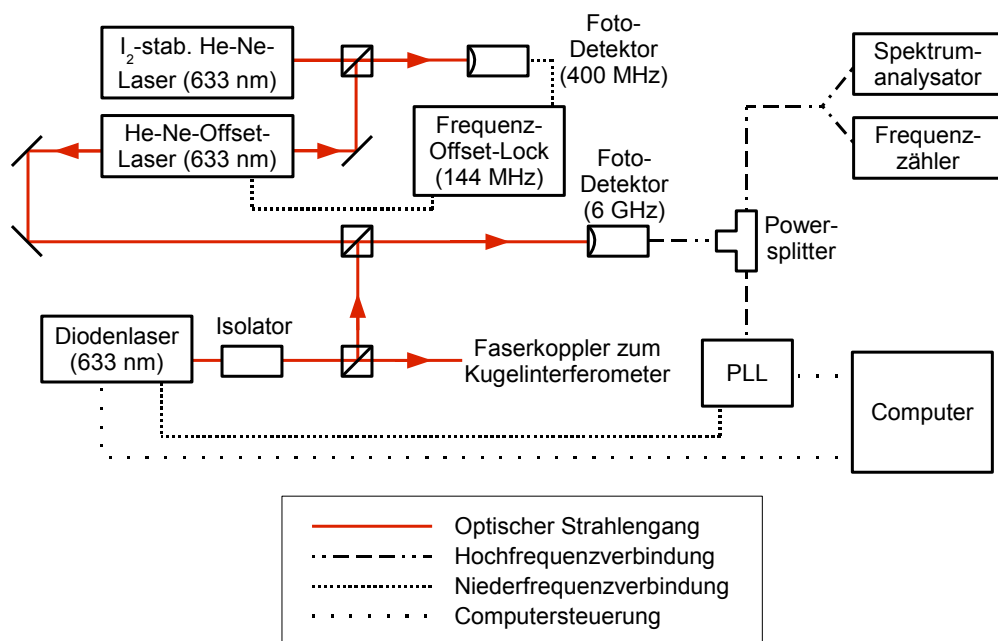


Abbildung 3.2: Schema der Laserstabilisierung

Die Rückführung des Kugeldurchmessers auf die SI-Einheit „Meter“ erfolgt durch einen Jod-stabilisierten He-Ne-Laser, an den der für die interferometrischen Messungen verwendete Diodenlaser – ein „External Cavity Diode Laser (ECL)“ [40] vom Typ *Vortex 6005* der Firma New Focus mit der nominalen Wellenlänge $\lambda = 633 \text{ nm}$ bei maximal 15 mW Ausgangsleistung – durch einen zweistufigen Offset-Lock angekoppelt wird. Dazu misst jeweils ein Fotodetektor das Schwebungssignal zwischen Diodenlaser und Offset-Laser bzw. Offset-Laser und Jod-stabilisiertem He-Ne-Laser. Ein detailliertes Schema des Laseraufbaus ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Am linken Rand sind die drei beteiligten Laser aufgeführt, deren Strahlen über Spiegel- und Strahlteileranordnungen auf zwei Fotodetektoren überlagert werden. Die dabei erhaltenen Schwebungsfrequenzen

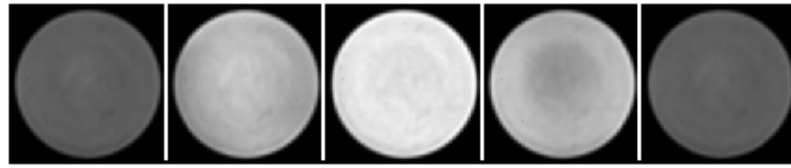
werden direkt prozessiert und durch die Frequenz-Offset-Lock- bzw. „Phase Locked Loop (PLL)“-Schaltung auf einen konstanten Wert geregelt. Dies ermöglicht computergesteuerte, schrittweise Änderungen der Frequenz des Diodenlasers mit einer Unsicherheit von unter 400 kHz und einer Bandbreite von bis zu 13 GHz ³. Da der Abstand der Referenzflächen im leeren Etalon ungefähr 150 mm beträgt, ergibt sich für den Phasenschiebealgorithmus mit der Schrittgröße einer viertel Interferenzordnung nach Abschnitt A.1 im Anhang eine benötigte Frequenzschrittweite von rund 250 MHz. Die Lücken zwischen der Kugel und den Referenzflächen sind etwa 30 mm groß, so dass in diesem Fall Frequenzschritte von rund 1250 MHz nötig sind. Eine exakte Bestimmung der erforderlichen Schrittgrößen ist über eine Selbstkalibrierung durchführbar, die das Phasenschiebeverfahren direkt ermöglicht [41]. Aus der Differenz der Gleichungen (2.15) und (2.16) lassen sich nach [35] Abweichungen von der Soll-Schrittgröße $\pi/2$ bestimmen. Mit diesem Kenntnis kann eine evtl. vorhandene Abweichung durch die iterative Anpassung der Schrittgröße beseitigt werden.

3.2 Ablauf der Durchmessermessungen

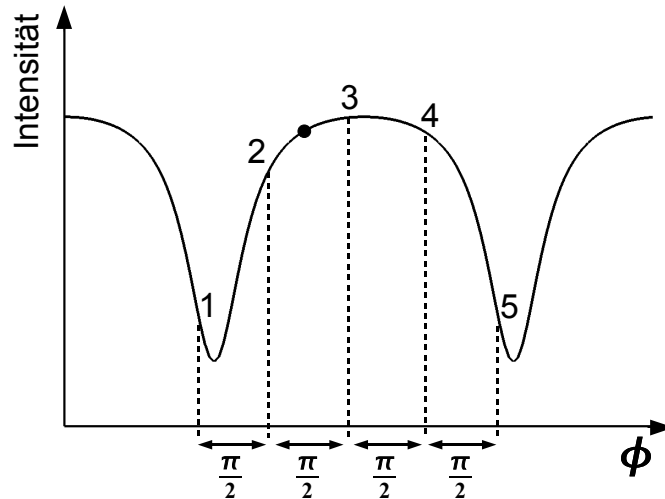
Eine Einzelmessung, bei der nur der gerade im 60°-Sichtfeld der Objektive befindliche Oberflächenausschnitt berücksichtigt wird, besteht aus folgenden Schritten. Die Kugel liegt in einer gewünschten Position auf der Dreipunktauflage und die Objektive sind entlang der optischen Achse so justiert, dass die mit den Kameras beobachteten Interferenzmuster so wenig Streifen oder Ringe wie möglich enthalten (je nachdem wie stark die Höhenvariation der Kugeloberfläche im betrachteten Bereich ausgeprägt ist). Im Idealfall erhält man eine homogene Intensitätsverteilung im gesamten Sichtfeld.

In dieser Ausgangssituation erfolgt je eine Messung mit Arm 1 und Arm 2 des Interferometers gemäß dem Phasenschiebeverfahren aus Abschnitt 2.2. Dazu wird jeweils eine Sequenz aus fünf Interferogrammen $I_1(n_x, n_y)$, $I_2(n_x, n_y)$, $I_3(n_x, n_y)$, $I_4(n_x, n_y)$ und $I_5(n_x, n_y)$ – mit (n_x, n_y) als Pixelkoordinaten – aufgenommen, wobei von Aufnahme zu Aufnahme die Interferenzphase über die Veränderung der Laserwellenlänge um $\pi/2$ verschoben ist. I_5 unterscheidet sich von I_1 um eine ganze Interferenzordnung, während sich die Intensitätswerte beider Interferogramme pixelweise nahezu gleichen (Abbildung 3.3). Die mit einem Fotodetektor gleichzeitig protokollierte Intensität des Lasers wird genutzt, um die fünf Aufnahmen auf das hellste Bild zu normieren. Anschließend wird die Kugel aus dem Strahlengang gehoben und erneut mit beiden Interferometerarmen jeweils eine Sequenz

³Vor der Umstellung auf die PLL-Regelung war mit der Frequenz-Offset-Schaltung eine Bandbreite von 5,5 GHz erreichbar.



(a)



(b)

Abbildung 3.3: (a) Exemplarische Sequenz von fünf Interferogrammen I_1 , I_2 , I_3 , I_4 und I_5 , die jeweils um $\pi/2$ in der Interferenzphase gegeneinander verschoben sind und nahezu homogene Intensitäten im gesamten Sichtfeld aufweisen. (b) Beispiel für die Intensitätsmodulation eines Kamerapixels. Der schwarze Punkt markiert die Stelle der nach Abschnitt 2.2 ermittelten Phase.

von fünf Interferogrammen aufgenommen. Nach Abschnitt 2.2 erhält man daraus je ein Phasenbild der beidseitigen Messungen mit Kugel $\phi_{K1}(n_x, n_y)$ und $\phi_{K2}(n_x, n_y)$ und die der Messungen des leeren Etalons $\phi_{E1}(n_x, n_y)$ und $\phi_{E2}(n_x, n_y)$. Die weitere Auswertung zum Durchmesser wird in Abschnitt 3.3 erläutert. Da für die Messungen in der Regel nicht die volle Pixelauflösung der Kamera, sondern ein 4-fach-Binning verwendet wird, enthält das auf den Kamerachip abgebildete Kreissegment rund 10000 Messwerte.

In der angehobenen Position kann die Kugel gedreht werden, um weitere Bereiche der Kugel mit Messungen abzudecken. Für eine typische Messung einer kompletten Kugeltopografie sind der Erfahrung nach etwa 20 oder mehr Einzelmessungen nötig, um eine lückenlose Abdeckung der Kugeloberfläche mit Messwerten zu erreichen, wobei sich benachbarte Segmente zum Teil überlappen. Ein exemplarisches Abdeckungsschema ist in Abbildung 3.4 dargestellt. Es resultiert aus einer Messstrategie, bei der die Kugel zunächst nach jeder Einzelmessung um die vertikale Achse um 30° gedreht wird, bis nach sechs

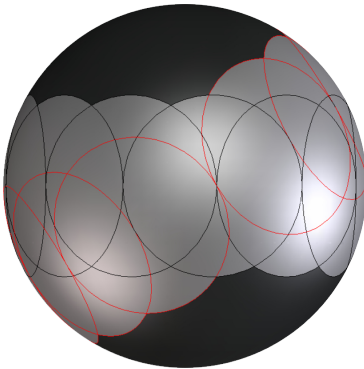


Abbildung 3.4: Exemplarisches Schema zum Messablauf mit 30°-Drehungsschritten, das nach vollständiger Durchführung 31 zweiseitige Einzelmessungen umfasst.

solcher Vorgänge – wegen der zweiseitigen Messung – ein Ring von überlappenden Messungen die Kugel umschließt. Nach einer Rückpositionierung in die Ausgangslage erfolgt eine 30°-Drehung um die horizontale Achse und anschließend eine Wiederholung der vorherigen Prozedur. Mit dieser Vorgehensweise sind 31 Einzelmessungen erforderlich, um die Kugeloberfläche lückenlos abzudecken. Durch Variation der Drehschrittgrößen oder Abweichung von der Regelmäßigkeit der Messstrategie (z. B. redundante oder zwischenplatzierte Messungen) ergibt sich in der Praxis eine Anzahl von 20 bis 40 Messungen für eine Kugel.

3.3 Durchmesserwertung

Aufbauend auf den Phasenwerten, die nach Abschnitt 2.2 ermittelt wurden, folgt hier die Beschreibung der weiteren Auswertung, um den Kugeldurchmesser zu erhalten. Bei den angegebenen Ergebnissen handelt es sich immer um die Phasenbilder $\phi(n_x, n_y)$, die auf den zweidimensionalen Kameraaufnahmen $I(n_x, n_y)$ beruhen. Um eine bessere Lesbarkeit zu gewährleisten, werden die Pixelkoordinaten (n_x, n_y) im Folgenden ausgelassen.

Die während einer Messung protokollierten Laserfrequenzen erlauben es, alle gemessenen Phasen auf die Wellenlänge des Jod-stabilisierten He-Ne-Laser zu referenzieren und damit die Rückführung auf die SI-Einheit der Länge zu realisieren. Dazu wird die Wellenlänge zur Frequenz der Jod-I-Linie $\lambda_I = c_{\text{Licht}}/f_I$ verwendet mit $f_I = 473612214,712\text{MHz}$ [42, 43] und der Vakuumlichtgeschwindigkeit $c_{\text{Licht}} = 299792458\text{m/s}$ [44]. Wenn während der Messung nicht die Jod-I-Linie, sondern z. B. die Jod-F-Linie verwendet wurde, muss neben der Offsetfrequenz des HilfsLasers f_{offset} , der Frequenzschrittweite der Phasenverschiebung mit dem Diodenlaser f_{schrift} und der Startfrequenz des Diodenlasers f_{start} zusätzlich die Frequenzabweichung $f_{\delta I}$ zwischen beiden Linien berücksichtigt werden. Für die Abweichung zwischen der zur gemessenen Phase

gehörenden Frequenz f_{mess} und f_I erhält man:

$$\delta f_{\text{mess}} = f_{\text{mess}} - f_I = f_{\delta I} + f_{\text{offset}} + f_{\text{start}} + 1,5 \cdot f_{\text{schrift}} . \quad (3.1)$$

Da jede einzelne Phasenmessung auf unterschiedlichen Frequenzen basiert, müssen alle Ergebnisse auf eine gemeinsame Referenz – hier ebenfalls die Jod-I-Linie – umgerechnet werden, damit schließlich alle Phasenmessungen zum Durchmesser verrechnet werden können. Zunächst wird dafür δf_{mess} durch die Bandbreite einer Interferenzordnung geteilt und der ganzzahlige Anteil verworfen:

$$IO_{\delta I} = \frac{\delta f_{\text{mess}}}{4 \cdot f_{\text{schrift}}} \mod 1 . \quad (3.2)$$

Durch Subtraktion dieses Bruchteils (multipliziert mit 2π) von der gemessenen Phase erhält man die Phase, die einer Messung mit der Wellenlänge der Jod-I-Linie entspricht, wodurch die weitere Verrechnung wie folgt durchgeführt werden kann.

Weil die Phase des Sekundärdatensatzes 2...5 um $\pi/2$ verschoben ist, muss von allen Sekundärmessungen der Wert $\pi/2$ subtrahiert werden. Anschließend werden in den Phasenbildern eventuell vorhandene 2π -Phasensprünge mit einem „Phase unwrapping“-Algorithmus korrigiert⁴ und schließlich die in Abschnitt 2.2 beschriebene Mittelung der Primär- und Sekundärmessungen durchgeführt. Man erhält dadurch die Phasenbilder

$$\phi_{K1} = \frac{\phi_{K1,1...4} + \left(\phi_{K1,2...5} - \frac{\pi}{2}\right)}{2} , \quad (3.3)$$

$$\phi_{E1} = \frac{\phi_{E1,1...4} + \left(\phi_{E1,2...5} - \frac{\pi}{2}\right)}{2} , \quad (3.4)$$

$$\phi_{K2} = \frac{\phi_{K2,1...4} + \left(\phi_{K2,2...5} - \frac{\pi}{2}\right)}{2} \quad \text{und} \quad (3.5)$$

$$\phi_{E2} = \frac{\phi_{E2,1...4} + \left(\phi_{E2,2...5} - \frac{\pi}{2}\right)}{2} , \quad (3.6)$$

wobei K1, K2, E1 und E2 jeweils die Messungen von Kugel und leerem Etalon mit den Interferometerarmen 1 und 2 bezeichnen. Darin sind die Phasensprünge auf Grund der Reflexionen an den Objektiv-Referenzflächen und der Kugeloberfläche enthalten. Aus der Differenz der Phasen des leeren Etalons und der Phasen, die sich mit der Kugel im Etalon

⁴Zur Anwendung kommt in diesem Fall die Prozedur „PUMD“ der Software XtremeFringe® von Indigen Optical Technologies (IOT) [45, 46]. „PUMD“ betrachtet auftretende Phasensprünge als Fehlerstellen und versucht diese so zu beseitigen, dass eine im Bild global ermittelte Maßzahl für das Auftreten von Sprungstellen minimiert wird („Minimum Discontinuity“-Kriterium) [47].

ergeben, folgt schließlich:

$$\phi_d = \frac{\phi_{E1} + \phi_{E2}}{2} - \phi_{K1} - \phi_{K2} , \quad (3.7)$$

wodurch die Kugeldurchmesservariation repräsentiert wird und die Phasensprünge der Referenzflächenreflexionen eliminiert werden. Der Phasensprung auf Grund des Fokushergangs im Etalon („Gouy phase shift“ [48]) spielt ebenfalls keine Rolle, da er nur im leeren Etalon auftritt und sich auf dem Hin- und Rückweg durch den doppelten Fokushergang von Fernfeld zu Fernfeld zu annähernd 2π summiert und davon verbleibende Abweichungen unterhalb der Auflösung der Interferenzauswertung liegen [49]. Die Entsprechung von ϕ_d als Bruchteil einer Interferenzordnung lautet schließlich

$$IO_{\text{Bruchteil}} = \frac{\phi_d}{2\pi} \bmod 1 . \quad (3.8)$$

Den verbleibenden Phasensprüngen an der Kugeloberfläche wird durch eine Korrektur Rechnung getragen, die am Ende dieses Abschnitts erläutert wird.

Da aus den Masse- und Dichtemessungen über die Volumenformel einer Kugel ein Vorwert für den Kugeldurchmesser wegen

$$V = \frac{m_{\text{Kugel}}}{\rho_{\text{Kugel}}} = \frac{4}{3} \pi \cdot \left(\frac{d_{\text{Vorwert}}}{2} \right)^3 \quad (3.9)$$

$$\Rightarrow d_{\text{Vorwert}} = \left(\frac{6}{\pi} \cdot \frac{m_{\text{Kugel}}}{\rho_{\text{Kugel}}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.10)$$

bekannt ist⁵, wobei m_{Kugel} die Masse und ρ_{Kugel} die Dichte bezeichnet, lässt sich der ganzzahlige Anteil von Interferenzordnungen für die absoluten Durchmesser ermitteln:

$$IO_{\text{Vorwert}} = \frac{d_{\text{Vorwert}}}{\frac{\lambda_I}{2}} - \frac{d_{\text{Vorwert}}}{\frac{\lambda_I}{2}} \bmod 1 . \quad (3.11)$$

Der gemessene Gesamtdurchmesser d_{mess} ergibt sich schließlich zu

$$d_{\text{mess}} = (IO_{\text{Vorwert}} + IO_{\text{Bruchteil}}) \cdot \frac{\lambda_I}{2} . \quad (3.12)$$

Da während der Messung die Temperatur im Interferometer nicht exakt bei der gewünschten Zieltemperatur von 20 °C gehalten werden kann, muss eine entsprechende Korrektur

⁵Für ein eindeutiges Ergebnis muss lediglich vorausgesetzt sein, dass m_{Kugel} und ρ_{Kugel} genau genug gemessen sind, um d_{Vorwert} mit einer Unsicherheit von höchstens $\lambda_I/2$ bestimmen zu können. Dies ist bei den Masse- und Dichtemessungen mit relativen Unsicherheiten von $u_{\text{rel}}(m) \approx 10^{-6}$ bzw. $u_{\text{rel}}(\rho) \approx 10^{-7}$ der Fall.

für die thermische Ausdehnung der Siliziumkugel angebracht werden. Mit den Parametern $\alpha_{0,\text{nat}}$ und $\alpha_{1,\text{nat}}$, durch die der Temperatúrausdehnungskoeffizient für natürliches Silizium⁶ ausgedrückt werden kann, und der Temperaturabweichung ΔT von 20 °C lautet der korrigierte Durchmesser:

$$d_{\text{mess}, 20^\circ\text{C}} = \frac{d_{\text{mess}}}{1 + \alpha_{0,\text{nat}} \cdot \Delta T + \alpha_{1,\text{nat}} \cdot \Delta T^2} . \quad (3.13)$$

Neben den Kugeln aus natürlichem Silizium existieren auch Kugeln aus angereichertertem ^{28}Si . Das in [51] prognostizierte abweichende Verhalten bei der thermischen Ausdehnung konnte durch entsprechende Messungen am Kugelinterferometer experimentell bestätigt werden [52], so dass für die Kugeln aus ^{28}Si ein anderer Temperatúrausdehnungskoeffizient verwendet werden muss. Weitere Informationen dazu sind in Abschnitt A.3 im Anhang umrissen.

Eine weitere wichtige Korrektur betrifft die Tatsache, dass die Glasfaserenden als Lichtquelle keine ideale Punktquelle darstellen, sondern eine Ausdehnung senkrecht zur Strahlachse besitzen. Ein Strahl, der die Faser nicht von der optischen Achse, sondern jenseits davon verlässt, wird vom Kollimator nicht exakt parallel zur optischen Achse weitergeführt und letztendlich nicht im Fokuspunkt der Objektiv-Referenzflächen fokussiert. Bereits in [53] wurde der Einfluss von schräg zur optischen Achse verlaufenden Strahlen bei interferometrischen Anwendungen untersucht. Diesem Aspekt muss auch beim Kugelinterferometer durch eine Aperturkorrektur Rechnung getragen werden, die für den Durchmesser wie folgt lautet [49, 54]:

$$\delta d_{\text{Apertur}} = - \frac{r_{\text{Faser}}^2 \cdot \cos^2 \alpha}{d_{\text{mess}, 20^\circ\text{C}}} . \quad (3.14)$$

Darin ist r_{Faser} der Faserbildradius in der Mitte des Etalons und α die vom Fokuspunkt des Etalons aus betrachtete Öffnungswinkelposition. Für eine Kugel der Größe $d_{\text{mess}, 20^\circ\text{C}} \approx 93,6 \text{ mm}$ und mit $r_{\text{Faser}} \approx \frac{200 \mu\text{m}}{2} \cdot \frac{10 \text{ cm}}{1,6 \text{ m}} = 6,25 \mu\text{m}$ ergibt sich beispielsweise $\delta d_{\text{Apertur}} \approx -0,42 \text{ nm}$ auf der optischen Achse ($\alpha = 0^\circ$) und $\delta d_{\text{Apertur}} \approx -0,32 \text{ nm}$ am Rand des Sichtfelds ($\alpha = 30^\circ$). Während der Auswertung wird die Korrektur für jedes Pixel abhängig von der Position im Sichtfeld ausgerechnet.

Die Oberfläche der Siliziumkugeln ist mit einer wenige Nanometer dicken Oxidschicht versehen, die bei der Kugelherstellung durch Kontakt mit der Umgebungsluft entsteht und dann konstant bleibt [19]. Da das Laserlicht in die SiO- und SiO₂-Schichten eindringen kann, ergibt sich ein Phasensprung, der den Durchmesser verfälscht. Ist die Oxidschichtdicke δr_{oxid} bekannt, kann eine Korrektur vorgenommen werden. Zu diesem Zweck erfolgt eine Charakterisierung der Schicht über eine Kombination aus Ellipsometrie für

⁶Die in [50] angegebenen Werte lauten:

$\alpha_{0,\text{nat}} = (2,5554 \pm 0,0002) \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ und $\alpha_{1,\text{nat}} = (4,58 \pm 0,04) \cdot 10^{-9} \text{ K}^{-2}$.

flächendeckende Messungen und XRR (X-Ray Reflectometry) zur absoluten Referenzierung [11]. Unter Annahme eines Modells der Oxidschichtzusammensetzung, das durch die Koeffizienten $C_{\text{oxid,a}}$ und $C_{\text{oxid,b}}$ definiert ist, lässt sich schließlich der Durchmesser korrigieren [49]:

$$\delta r_{\text{Phasensprung}} = C_{\text{oxid,a}} + C_{\text{oxid,b}} \cdot \delta r_{\text{oxid}} . \quad (3.15)$$

Der korrigierte Kugeldurchmesser lautet damit:

$$D_{\text{Kugel}} = d_{\text{mess, 20 °C}} + \delta d_{\text{Apertur}} + 2 \cdot \delta r_{\text{Phasensprung}} \quad (3.16)$$

und für den reinen Siliziumkern

$$D_{\text{SiKern}} = D_{\text{Kugel}} - 2 \cdot \delta r_{\text{oxid}} . \quad (3.17)$$

3.4 Koordinatenzuordnung der Messwerte

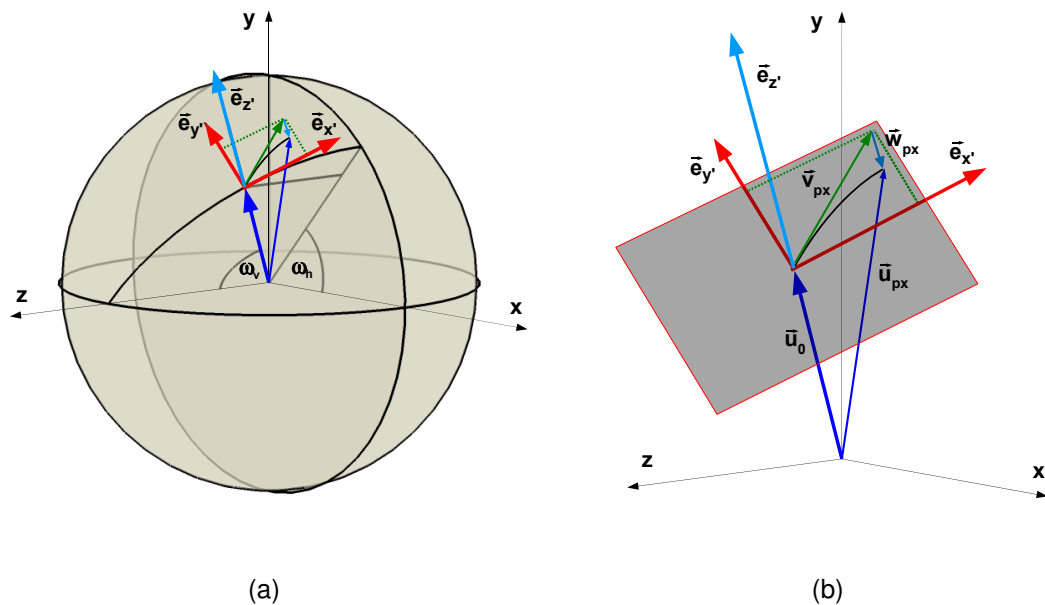


Abbildung 3.5: Skizze zur Umrechnung der Messkoordinaten

Um eine Zuordnung der Messwerte zu eindeutigen Positionen auf der Kugeloberfläche abhängig von der jeweiligen Orientierung der Kugel zu ermöglichen, wird an dieser Stelle die Herleitung der entsprechenden analytischen Zusammenhänge vorgestellt. Die analytische Form hat gegenüber der vorherigen Implementierung den Vorteil, dass sie erstens

übersichtlicher und zweitens leicht invertierbar ist. Letzterer Aspekt spielt besonders für Abschnitt 4.3 eine Rolle, wo der umgekehrte Weg – von gegebenen Kugelkoordinaten zu einem Messwert – gesucht ist.

Zunächst wird das nötige Koordinatensystem definiert. Das Koordinatensystem des Interferometers sei so festgelegt, dass von Arm 1 aus betrachtet die z-Achse entgegen der Blickrichtung auf der optischen Achse verläuft. Die x-Achse zeige nach rechts und die y-Achse nach oben. In der justierten Ausgangsposition liegt die Kugel so im Interferometer, dass die Koordinatensysteme von Kugel und Interferometer übereinstimmen. Für die Abfolge der Messungen kann die Kugel – und damit ihr Koordinatensystem – um die z-Achse (horizontal) und um die y-Achse (vertikal) gedreht werden. Da die Drehungen im Allgemeinen nicht kommutativ sind, wird für die folgenden Überlegungen die während der Messungen übliche Abfolge von einer Drehung um die horizontale Achse und einer anschließenden Drehung um die vertikale Achse vorausgesetzt. Die Einheitsvektoren im Koordinatensystem des Interferometers $\vec{e}_{x'}$, $\vec{e}_{y'}$ und $\vec{e}_{z'}$ werden dabei in die Einheitsvektoren des Koordinatensystem der Kugel \vec{e}_x , \vec{e}_y und \vec{e}_z durch die folgende linksdrehende Transformationsmatrix überführt:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = \mathbf{T}_{\omega_v} \mathbf{T}_{\omega_h} &= \begin{pmatrix} \cos \omega_v & 0 & -\sin \omega_v \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \omega_v & 0 & \cos \omega_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \omega_h & \sin \omega_h & 0 \\ -\sin \omega_h & \cos \omega_h & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \omega_v \cos \omega_h & \cos \omega_v \sin \omega_h & -\sin \omega_v \\ -\sin \omega_h & \cos \omega_h & 0 \\ \sin \omega_v \cos \omega_h & \sin \omega_v \sin \omega_h & \cos \omega_v \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Darin bezeichnet ω_h den Drehwinkel um die horizontale Achse und ω_v den Drehwinkel um die vertikale Achse. Abhängig von der durchgeführten Drehung wird nun ein Ausschnitt der Kugeloberfläche durch das optische System auf die Pixel des Kamerachips abgebildet, der parallel zur x'-y'-Ebene ausgerichtet ist und in seinem Mittelpunkt von der z'-Achse geschnitten wird. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 3.5 skizziert. Der Vektor \vec{u}_0 zeigt in Richtung des Mittelpunkts des Kamerachips und \vec{v}_{px} von dort auf eine Pixelposition innerhalb der Chipebene. Die dorthin abgebildete Stelle der Kugel wird von \vec{u}_{px} angedeutet und \vec{w}_{px} stellt die Verbindung senkrecht zur Kamerachipebene her. Damit ergibt sich der Zusammenhang

$$\vec{u}_{px} = \vec{u}_0 + \vec{v}_{px} + \vec{w}_{px} \quad (3.19)$$

$$= r_F \cdot \vec{e}_{z'} + v_{px,x} \cdot \vec{e}_{x'} + v_{px,y} \cdot \vec{e}_{y'} + \tau \cdot \vec{e}_{z'}. \quad (3.20)$$

Wegen $\vec{e}_i = \mathbf{T} \vec{e}_{i'} \Leftrightarrow \vec{e}_{i'} = \mathbf{T}^{-1} \vec{e}_i$ mit $i \in \{x, y, z\}$ erhält man die Darstellung im Koordi-

natensystem der Kugel:

$$\vec{u}_{px} = r_F \cdot \mathbf{T}^{-1} \vec{e}_z + v_{px,x} \cdot \mathbf{T}^{-1} \vec{e}_x + v_{px,y} \cdot \mathbf{T}^{-1} \vec{e}_y + \tau \cdot \mathbf{T}^{-1} \vec{e}_z. \quad (3.21)$$

Mit \vec{u}_{px} in Kugelkoordinaten ϑ und φ ausgedrückt als

$$\vec{u}_{px} = \begin{pmatrix} r_F \cdot \sin \vartheta \cos \varphi \\ r_F \cdot \sin \vartheta \sin \varphi \\ r_F \cdot \cos \vartheta \end{pmatrix}$$

erhält man ein dreizeiliges Gleichungssystem mit den Variablen ϑ , φ und τ :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} &= \mathbf{T}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{v_{px,x}}{r_F} \cdot \mathbf{T}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{v_{px,y}}{r_F} \cdot \mathbf{T}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + \frac{\tau}{r_F} \cdot \mathbf{T}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \underbrace{\begin{pmatrix} \sin \omega_v \cos \omega_h \\ \sin \omega_v \sin \omega_h \\ \cos \omega_v \end{pmatrix} + \frac{v_{px,x}}{r_F} \cdot \begin{pmatrix} \cos \omega_v \cos \omega_h \\ \cos \omega_v \sin \omega_h \\ -\sin \omega_v \end{pmatrix} + \frac{v_{px,y}}{r_F} \cdot \begin{pmatrix} -\sin \omega_h \\ \cos \omega_h \\ 0 \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} f_x \\ f_y \\ f_z \end{pmatrix}} \\ &\quad + \underbrace{\frac{\tau}{r_F} \cdot \begin{pmatrix} \sin \omega_v \cos \omega_h \\ \sin \omega_v \sin \omega_h \\ \cos \omega_v \end{pmatrix}}_{\tau \cdot \begin{pmatrix} g_x \\ g_y \\ g_z \end{pmatrix}} \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi &= f_x + \tau \cdot g_x \\ \sin \vartheta \sin \varphi &= f_y + \tau \cdot g_y \\ \cos \vartheta &= f_z + \tau \cdot g_z \end{vmatrix}. \quad (3.23)$$

Umformen der dritten Zeile nach τ und Einsetzen in die ersten beiden Zeilen eliminiert τ :

$$\begin{vmatrix} \sin \vartheta \cdot \cos \varphi &= \frac{f_x g_z - f_z g_x}{g_z} + \frac{g_x}{g_z} \cdot \cos \vartheta \\ \sin \vartheta \cdot \sin \varphi &= \frac{f_y g_z - f_z g_y}{g_z} + \frac{g_y}{g_z} \cdot \cos \vartheta \end{vmatrix}. \quad (3.24)$$

Der weitere Lösungsweg ist im Anhang in Abschnitt A.2 auf Seite 123 dokumentiert. An dieser Stelle soll die Angabe der erhaltenen Ausdrücke für ϑ und φ genügen:

$$\vartheta = \arccos \left(\sqrt{1 - 4 \sin^2 \alpha \cdot \left(\frac{n_x^2}{N_{px,x}^2} + \frac{n_y^2}{N_{px,y}^2} \right)} \cdot \cos \omega_v - 2 \sin \alpha \cdot \frac{n_x}{N_{px,x}} \cdot \sin \omega_v \right), \quad (3.25)$$

$$\varphi = \arctan \left(\frac{2 \sin \alpha \cdot \frac{n_x}{N_{px,x}} \cdot \cos \omega_v \sin \omega_h + 2 \sin \alpha \cdot \frac{n_y}{N_{px,y}} \cdot \cos \omega_h + \sqrt{1 - 4 \sin^2 \alpha \cdot \left(\frac{n_x^2}{N_{px,x}^2} + \frac{n_y^2}{N_{px,y}^2} \right)} \cdot \sin \omega_v \sin \omega_h}{2 \sin \alpha \cdot \frac{n_x}{N_{px,x}} \cdot \cos \omega_v \cos \omega_h - 2 \sin \alpha \cdot \frac{n_y}{N_{px,y}} \cdot \sin \omega_h + \sqrt{1 - 4 \sin^2 \alpha \cdot \left(\frac{n_x^2}{N_{px,x}^2} + \frac{n_y^2}{N_{px,y}^2} \right)} \cdot \sin \omega_v \cos \omega_h} \right) + \kappa, \quad (3.26)$$

wobei der Wert von κ von den Vorzeichen in Zähler und Nenner abhängt (vgl. Tabelle 3.1).

Mit den Umrechnungsgleichungen (3.25) und (3.26) kann nun einem Messwert an der Pixelposition (n_x, n_y) auf dem Kamerachip unter Berücksichtigung der durchgeführten Kugeldrehung um die Winkel ω_h und ω_v eine eindeutige Position (ϑ, φ) auf der Kugel zugeordnet werden.

Zähler	Nenner	κ
+	+	0
+	-	π
-	-	π
-	+	2π

Tabelle 3.1: Abhängigkeit des Parameters κ von den Vorzeichen von Zähler und Nenner in Gleichung (3.26).

3.5 Ansätze zur Volumenberechnung

Da es das Ziel der Messungen am Kugelinterferometer für das Avogadro-Projekt ist, das Volumen der Siliziumkugeln anzugeben, müssen die Durchmesserdatensätze entsprechend ausgewertet werden. Nach [55] und [56] lässt sich das Kugelvolumen hinreichend genau aus dem mittleren Durchmesser ermitteln, wenn die Formabweichungen von einer idealen Sphäre verglichen mit deren Grundradius sehr klein sind. Der direkte Mittelwert

der Gesamtmenge aller Einzeldurchmesser liefert jedoch nicht das korrekte Ergebnis, weil die Verteilung der Messpositionen auf der Kugeloberfläche im Allgemeinen nicht gleichmäßig ist. Dies würde zu einer den Mittelwert verfälschenden Gewichtung führen. Deshalb werden im Folgenden zwei Methoden vorgestellt, die dieser Tatsache Rechnung tragen und den mittleren Durchmesser d_{Mittel} und damit das Volumen korrekt bestimmen lassen.

Die erste Variante beruht auf der Anpassung von Kugelflächenfunktionen, was allerdings die (speicherbedingte) Einschränkung mit sich bringt, hohe Ortsfrequenzen der Topografie nicht berücksichtigen zu können. Für den Fall, dass auch die Feinstruktur der Kugeltopografie von Interesse ist und aufgelöst werden soll, wird im darauf folgenden Unterabschnitt eine zweite Methode der Datenauswertung vorgestellt, die auf einer Einteilung der Kugeloberfläche in kleine Zellen basiert.

3.5.1 Fit mit Kugelflächenfunktionen

Eine Möglichkeit besteht darin, einen Satz von Kugelflächenfunktionen an die Messwertwolke anzupassen, so dass sich eine genäherte Rekonstruktion der Durchmesser-Topografie ergibt. Das Volumen lässt sich schließlich über eine Integration erhalten.

Die übliche Definition der Kugelflächenfunktionen [57] lautet

$$Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi) = N_{\ell m} P_{\ell}^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (3.27)$$

mit dem Normierungsfaktor

$$N_{\ell m} = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \quad (3.28)$$

und den zugeordneten Legendre-Polynomen $P_{\ell}^m(\cos \vartheta)$ [58]. Da im Fall der Kugeltopografien ausschließlich reellwertige Funktionen benötigt werden, seien reelle Kugelflächenfunktionen wie folgt definiert:

$$Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{\ell}^m + (-1)^m Y_{\ell}^{-m}) & \text{für } m \geq 0 \\ \frac{1}{i\sqrt{2}} (Y_{\ell}^{-m} - (-1)^m Y_{\ell}^m) & \text{für } m < 0 \end{cases} \quad (3.29)$$

$$= \begin{cases} \sqrt{2} N_{\ell m} P_{\ell}^m(\cos \vartheta) \cos(m\varphi) & \text{für } m \geq 0 \\ \sqrt{2} N_{\ell m} P_{\ell}^{-m}(\cos \vartheta) \sin(m\varphi) & \text{für } m < 0 \end{cases} . \quad (3.30)$$

Die Durchmessertopografie $\mathcal{R}_d(\vartheta, \varphi)$ lässt sich damit über die Entwicklungskoeffizienten $k_{\ell m}$ parametrisieren:

$$\mathcal{R}_d(\vartheta, \varphi) = \sum_{\substack{\ell=0 \\ \frac{\ell}{2} \in \mathbb{N}}}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} k_{\ell m} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi). \quad (3.31)$$

Die Einschränkung $\ell/2 \in \mathbb{N}$ sorgt dafür, dass nur die zum Kugelmittelpunkt symmetrischen Kugelflächenfunktionen in die Entwicklung eingehen. Dies ist sinnvoll, weil es sich bei der Durchmessertopografie um ein zum Mittelpunkt symmetrisches Gebilde handelt, bei dem diametral gegenüberliegende Radien den gleichen Betrag haben (daher auch die Wahl der Bezeichnung \mathcal{R}_d). In der Praxis ist die Parametrisierung nur mit einer begrenzten Anzahl von Koeffizienten $k_{\ell m}$ durchführbar, so dass die Doppelsumme nur so weit ausgeführt wird, bis N_{SH} Koeffizienten berücksichtigt sind.⁷

In Matrixschreibweise lässt sich der Fit an die Punktwolke nach Gleichung (3.31) dann kompakt ausdrücken als

$$\mathbf{r}_d = \mathbf{A} \mathbf{k}, \quad (3.32)$$

mit den Elementen von \mathbf{r}_d als

$$(r_d)_i = \frac{d_i}{2} \quad (3.33)$$

an der Stelle $(\vartheta, \varphi)_i = (\vartheta_i, \varphi_i)$ mit $i = 1, \dots, N_{\text{row}}$ und

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} Y_{00}(\vartheta_1, \varphi_1) & Y_{2-2}(\vartheta_1, \varphi_1) & Y_{2-1}(\vartheta_1, \varphi_1) & \cdots & Y_{N_{\text{SH}}-1, N_{\text{SH}}-1}(\vartheta_1, \varphi_1) \\ Y_{00}(\vartheta_2, \varphi_2) & Y_{2-2}(\vartheta_2, \varphi_2) & Y_{2-1}(\vartheta_2, \varphi_2) & \cdots & Y_{N_{\text{SH}}-1, N_{\text{SH}}-1}(\vartheta_2, \varphi_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Y_{00}(\vartheta_{N_{\text{row}}}, \varphi_{N_{\text{row}}}) & Y_{2-2}(\vartheta_{N_{\text{row}}}, \varphi_{N_{\text{row}}}) & Y_{2-1}(\vartheta_{N_{\text{row}}}, \varphi_{N_{\text{row}}}) & \cdots & Y_{N_{\text{SH}}-1, N_{\text{SH}}-1}(\vartheta_{N_{\text{row}}}, \varphi_{N_{\text{row}}}) \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

Das überbestimmte Gleichungssystem ist dann über einen Least-Squares-Ansatz [59] bezüglich der $k_{\ell m}$ zu lösen, um letztendlich die Durchmessertopografie gemäß Gleichung (3.31) rekonstruieren zu können. Der Koeffizient k_{00} der Kugelflächenfunktion 0. Ordnung, die einem über alle Koordinaten konstanten Offset entspricht, gibt bei kleinen Formabweichungen annähernd den mittleren Radius r_{Mittel} wieder, was zum Beispiel in [60] ausgenutzt wird. Mathematisch exakt erhält man den mittleren Durchmesser

⁷Die gewählte Bezeichnung N_{SH} ist vom englischen Ausdruck für Kugelflächenfunktionen („spherical harmonics“) abgeleitet.

$d_{\text{Mittel}} = 2 \cdot r_{\text{Mittel}}$ aus folgendem Integralausdruck:

$$r_{\text{Mittel}} = \frac{\int_{\Omega} \mathcal{R}_d(\vartheta, \varphi) \, d\Omega}{\int_{\Omega} 1 \, d\Omega} \quad (3.35)$$

$$= \frac{\int_0^{\pi} \sin \vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} \mathcal{R}_d(\vartheta, \varphi) \, d\varphi}{\int_0^{\pi} \sin \vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} 1 \, d\varphi} \quad (3.36)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \cdot \int_0^{\pi} \sin \vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} \left(\sum_{\substack{\ell=0 \\ \frac{\ell}{2} \in \mathbb{N}}}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} k_{\ell m} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) \right) d\varphi \, d\vartheta \quad (3.37)$$

$$= \sum_{\substack{\ell=0 \\ \frac{\ell}{2} \in \mathbb{N}}}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \left(k_{\ell m} \cdot \frac{1}{4\pi} \cdot \int_0^{\pi} \sin \vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) \, d\varphi \, d\vartheta \right). \quad (3.38)$$

Es müssen also lediglich die Koeffizienten $k_{\ell m}$ und die Integrale der verwendeten reellen Kugelflächenfunktionen über den vollen Raumwinkel Ω bekannt sein, um die Doppelsumme ausführen zu können und darüber r_{Mittel} und damit auch d_{Mittel} zu erhalten.

Das Kugelvolumen ist dann genähert gemäß

$$V_K = \frac{4}{3} \pi \cdot r_{\text{Mittel}}^3 = \frac{4}{3} \pi \cdot \left(\frac{d_{\text{Mittel}}}{2} \right)^3 \quad (3.39)$$

oder mathematisch exakt über das folgende Integral zu bestimmen:

$$V_K = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\mathcal{R}_d(\vartheta, \varphi)} r^2 \sin \vartheta \, dr \, d\varphi \, d\vartheta \quad (3.40)$$

$$= \frac{1}{3} \int_0^{\pi} \sin \vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} [\mathcal{R}_d(\vartheta, \varphi)]^3 \, d\varphi \, d\vartheta. \quad (3.41)$$

Zwar ist die Anpassung mit Kugelflächenfunktionen aus praktischen Gründen nur bis zu einem Grad N_{SH} möglich, so dass hochfrequente Anteile der Topografie verloren gehen. Aber wenn der entstehende Fehler, der auch das Volumen beeinflussen kann, ohnehin klein genug ist, kann dieser Aspekt vernachlässigt werden.

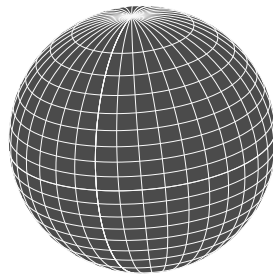
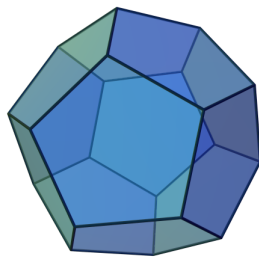
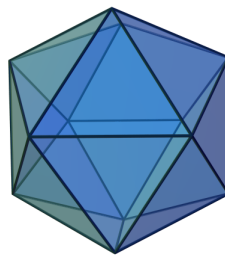


Abbildung 3.6: Gitter aus Längen- und Breitengraden



(a)



(b)

Abbildung 3.7: Die zwei größten platonischen Körper (a) Dodekaeder und (b) Ikosaeder.

3.5.2 Gittersortierung

Um die Feinheiten der Kugeloberfläche erfassen zu können, reicht die Anpassung von Kugelflächenfunktionen in der Praxis nicht aus. Als Alternative bietet sich an, die Oberfläche mit einem gleichmäßigen Gitter in kleine Zellen einzuteilen und alle Messwerte innerhalb der selben Zelle lokal zu mitteln. Weil sich der mittlere Kugeldurchmesser aus dem Mittelwert aller lokal gemittelten Durchmesser ohne eine falsche Gewichtung berechnen lässt, kann daraus schließlich das Volumen der Kugel bestimmt werden.

Ein erster Ansatz ist in [61] beschrieben. Gemäß der dort beschriebenen Methode wird die Kugeloberfläche in Zellen gleichen Flächeninhalts unterteilt, die sich durch ein Gitter aus Längen- und Breitengraden analog zum Erdkoordinatensystem (Abbildung 3.6) ergeben. Die gleichen Flächeninhalte resultieren aus der gleichabständigen Einteilung von $\cos \vartheta$ und φ . Ein störender Aspekt daran ist, dass die Flächenform von den Polen (gestreckte Dreiecke) bis zum Äquator (Rechtecke) stark variiert.

Im Rahmen dieser Arbeit wird daher eine alternative Ansatzweise für die Zerlegung der Kugeloberfläche in Einzelzellen zur Datenauswertung eingeführt. Zunächst sei noch erwähnt, dass es nicht möglich ist, mehr als 20 Punkte mathematisch exakt gleichmäßig auf einer Kugel zu verteilen. Die Positionen dieser maximalen, ideal verteilten Anzahl von Punkten sind durch die 20 Eckpunkte (Vertizes) eines Dodekaeders (Abbildung 3.7(a)) gegeben, die zu ihren nächsten Nachbarn exakt den selben Abstand besitzen. Eine äquiva-

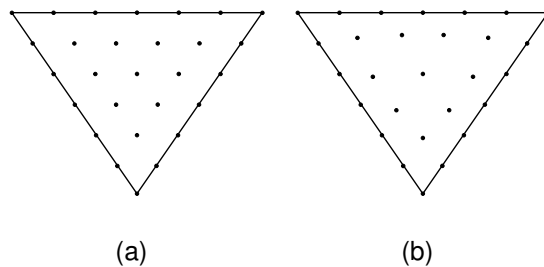


Abbildung 3.8: Schema zur Veranschaulichung der Unterteilung einer Dreiecksfläche in kleinere Dreiecksegmente. Die Punkte geben die Vertices der Dreiecksegmente (a) vor und (b) nach der Projektion auf eine Kugeloberfläche an.

lente Beschreibung liefert der duale Körper des Dodekaeders: das Ikosaeder (Abbildung 3.7(b)). Die feinste mathematisch ideale Gittereinteilung der Kugeloberfläche ist damit durch diese beiden Körper festgelegt. Weil sich jeweils zwei Punkte gegenüber liegen, könnte man maximal zehn lokale Durchmesser-Mittelwerte bestimmen. Für die Angabe eines mittleren Kugeldurchmessers reichen zehn Werte allerdings längst nicht aus, was in Abschnitt 4.2 noch detailliert untersucht wird.

In [62] ist eine Übersicht aufgeführt, die diverse systematische und zufallsbasierte Methoden für Punkteverteilungen auf Kugeloberflächen nebeneinander stellt. Darunter befinden sich unter anderem Ansätze, bei denen die Punkte spiralförmig von einem Pol zum anderen angeordnet sind, als gleich geladene Teilchen über Abstoßung einen quasi-stabilen Zustand erreichen oder stochastisch verteilt sind. Für die Untersuchungen im Rahmen der vorliegenden Arbeit kommt im Folgenden eine Methode zur Anwendung, die im Gebiet der Klimamodellierung verwendet wird. Sie basiert auf systematisch konstruierten geodätischen Gittern, die durch sukzessive Flächeneinteilung aus einem Ikosaeder hervorgehen [63]. Eine spezielle Variante davon wird in [64] beschrieben. Dabei werden Kugel und Ikosaeder ineinander gesetzt, die Flächen des Ikosaeders in kleine, gleich große Dreiecksegmente unterteilt (Abbildung 3.8(a)) und deren Eckpunkte radial auf die Kugeloberfläche projiziert. Durch die Projektion verschieben sich die Vertices relativ zueinander, was zur Folge hat, dass ihre umgebenden Flächen – die zugehörigen Voronoi-Zellen [65] – nicht mehr den gleichen Flächeninhalt haben (Abbildung 3.8(b)). Um diesen Effekt zu minimieren, werden die Vertices lateral verschoben. Als Ergebnis erhält man eine Punktwolke, die gleichmäßig über die Kugeloberfläche verteilt ist und bei der jedem Vertex nahezu der gleiche Flächeninhalt zugeordnet werden kann. Als Beispiel sind in Abbildung 3.9 einige Punktverteilungen mit unterschiedlicher Anzahl von Vertices dargestellt. Abbildung 3.10 zeigt eine Nahansicht, in der die hexagonalen Voronoi-Zellen von vier Vertices farblich markiert sind.

In Abbildung 3.11 sind exemplarisch für verschiedene Gitter die zu den Vertices zugeordneten Flächen in betragsmäßig aufsteigender Reihenfolge gezeigt. Die Diskrepanz zwischen minimalem und maximalem Flächeninhalt beträgt bei einigen tausend Vertices

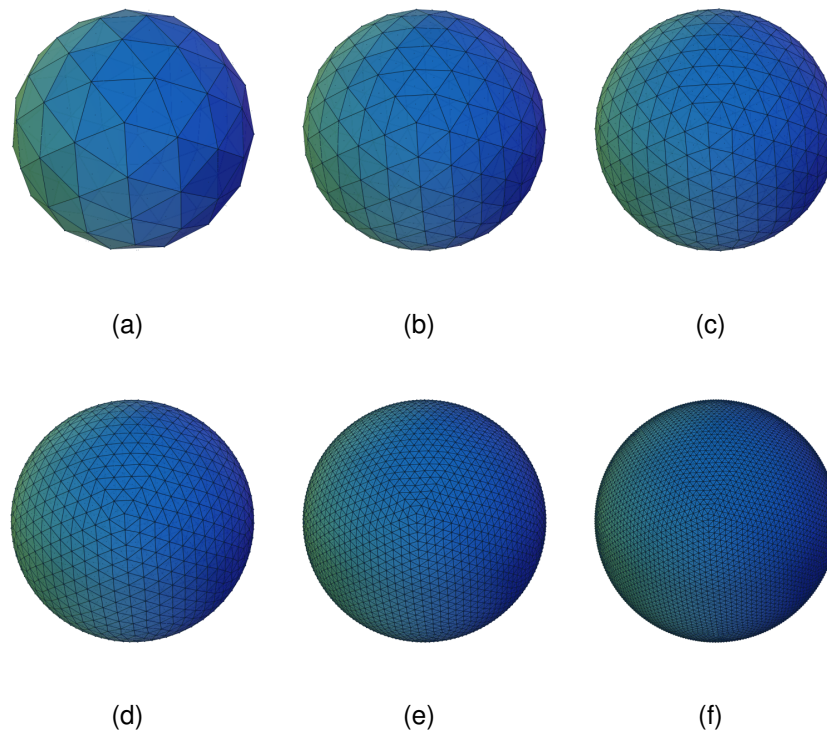


Abbildung 3.9: Exemplarische Punktverteilungen auf der Oberfläche einer Kugel: (a) 92 Vertizes, (b) 252 Vertizes, (c) 492 Vertizes, (d) 1212 Vertizes, (e) 3612 Vertizes und (f) 8412 Vertizes.

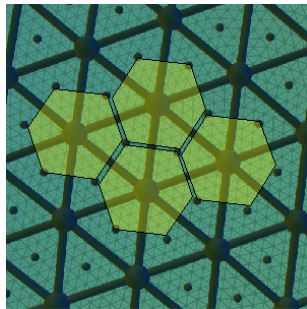


Abbildung 3.10: Vergrößerte Darstellung von Abbildung 3.9(f), in der die Voronoi-Zellen von vier Vertizes gelb markiert sind. Die kleinen Punkte markieren jeweils den Mittelpunkt der Dreiecke, aus denen das Gitter besteht.

unter Ausnutzung der in [64] beschriebenen Methode nur noch weniger als 1 %. Davon ausgenommen sind die zwölf ursprünglichen Vertices des Ikosaeders, deren zugeordnete Fläche um ca. 10 bis 20 % vom Rest abweicht. Dieser Tatsache kann durch Einbeziehung einer Gewichtung nach Flächengröße der an jedem Vertex lokal gemittelten Durchmesser für den Gesamtmittelwert der Durchmesser Rechnung getragen werden.

Die beschriebene Art der Gittereinteilung wird schließlich benutzt, um die zu Beginn des Abschnitts erwähnte Berechnung des mittleren Kugeldurchmessers d_{Mittel} durchzuführen. Weil die im Vergleich zur Größe der Kugel sehr geringen Abweichungen von einer perfekten sphärischen Form nur einen vernachlässigbaren Fehler verursachen [55, 66], lässt

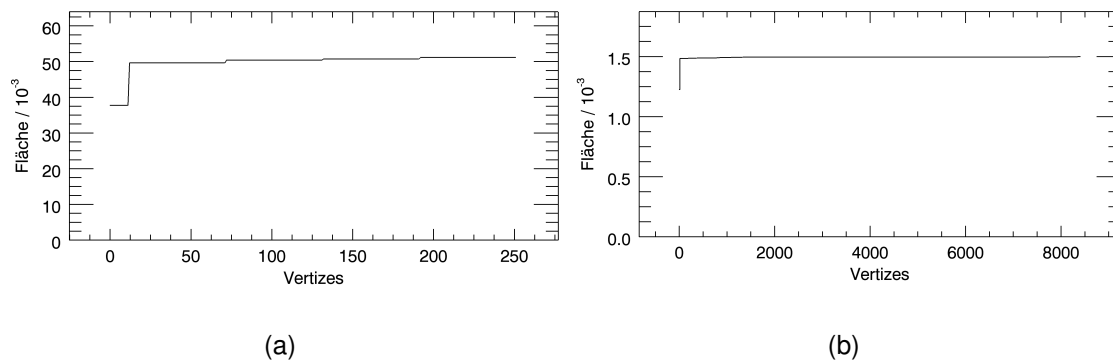


Abbildung 3.11: Exemplarische Auswahl der den Vertices zugeordneten Flächen auf der Oberfläche der Einheitskugel betragsmäßig aufsteigend sortiert: (a) 252 Vertices und (b) 8412 Vertices.

sich das Volumen dann über Gleichung (3.39) bestimmen.

Die Menge an einzelnen Messwerten ist nach einer üblichen Messprozedur mit dem Kugelinterferometer groß (mehrere 10^5 Werte) und deckt daher die Kugeloberfläche dicht ab. Deshalb kann ein fein strukturiertes Gitter mit einigen tausend Vertices zur Bestimmung des mittleren Durchmessers herangezogen werden, ohne dass einige Zellen unbesetzt bleiben. Sollten dennoch Vertices ohne zugeordnete Messwerte auftreten, bleibt als Alternative die Verwendung eines gröberen Gitters. Jedoch gilt auch eine untere Grenze für die Vertexanzahl, um nicht durch Unterabtastung der Oberflächenstruktur ein ungenaues Ergebnis zu erhalten. Dieser Aspekt wird in Abschnitt 4.2 detailliert behandelt.

In der vorliegenden Arbeit wird – wenn nicht anders erwähnt – ein Gitter mit 8412 Vertices verwendet. Da sich jeweils zwei Vertices gegenüber liegen, entspricht das einer Anzahl von 4206 Durchmessern.

3.6 Ergebnisse der Durchmesserauswertung

Auf der Grundlage der vorausgegangenen Auswertungsbeschreibung folgt nun eine Übersicht der Ergebnisse einiger Kugelmessungen. Die Datenauswertung erfolgte dabei mit einer vollständigen Neuimplementierung der notwendigen Routinen in der vektororientierten Interpretersprache IDL (*Interactive Data Language*) [67], die nützlicherweise einige Kartenprojektionstypen zur Darstellung von auf Kugeln bezogene Daten bereit stellt. Die Abbildungen 3.13 bis 3.18 zeigen jeweils die Durchmessertopografie und rechts daneben die zu Grunde liegende Verteilung der Messwerte als Mollweide-Projektionen⁸. Während die Farbskala der Messwertverteilung ohne weitere Werteangaben lediglich die

⁸In der Mollweide-Kartenprojektion, wird die gesamte Erdoberfläche als Ellipse flächentreu darstellt [68].

	$\frac{d_{\text{Mittel}}}{2} / \text{nm}$	$\frac{d_{\text{Min}}}{2} / \text{nm}$	$\frac{d_{\text{Max}}}{2} / \text{nm}$	P-V / nm
<i>Avo1</i>	46.8138139	46.8137979	46.8138287	30.7
(Fit)	46.8138139	46.8137986	46.8138278	29.2
<i>Avo2</i>	46.8140256	46.8140160	46.8140320	16.0
(Fit)	46.8140256	46.8140162	46.8140318	15.6
<i>Avo3</i>	46.8172103	46.8172016	46.8172209	19.3
(Fit)	46.8172103	46.8172018	46.8172209	19.1
<i>Si3</i>	46.8102971	46.8102792	46.8103293	50.1
(Fit)	46.8102971	46.8102802	46.8103285	48.3
<i>Avo28-S5</i>	46.8614858	46.8614555	46.8615038	48.4
(Fit)	46.8614858	46.8614569	46.8615031	46.2
<i>Avo28-S8</i>	46.8611255	46.8611033	46.8611475	44.3
(Fit)	46.8611255	46.8611019	46.8611466	44.7

Tabelle 3.2: Mittlere Radien $d_{\text{Mittel}}/2$, minimale und maximale Werte $d_{\text{Min}}/2$ bzw. $d_{\text{Max}}/2$ und die entsprechenden P-V-Werte der in den Abbildungen 3.13 bis 3.18 dargestellten Radiustopografien. Aufgeführt sind die Ergebnisse von Gittersortierung und Fit mit Kugelflächenfunktionen ($N_{\text{SH}} = 250$). Eine Unsicherheitsbetrachtung folgt in Abschnitt 4.1.1.

Verteilung qualitativ veranschaulichen soll, wird die Farbskala der Topografie in Tabelle 3.2 spezifiziert. Angegeben sind darin die mittleren Radien $d_{\text{Mittel}}/2$, die in der jeweiligen Topografie auftretenden Minimum- und Maximum-Werte $d_{\text{Min}}/2$ und $d_{\text{Max}}/2$ und der sich daraus ergebende „Peak to Valley (P-V)“-Wert für vier Kugeln aus natürlichem Silizium (*Avo1*, *Avo2*, *Avo3* und *Si3*) und zwei Kugeln aus angereichertem ^{28}Si [69] (*Avo28-S5* und *Avo28-S8*). Es handelt sich dabei um die Radien, die sich für die Umgebungsbedingungen bei 20 °C und Vakuum (0 Pa) und mit Berücksichtigung der Aperturkorrektur ergeben. Da es im Rahmen dieser Arbeit unerheblich ist, ob die Ergebnisse hinsichtlich der Oxidschicht korrigiert sind oder nicht, wird darauf verzichtet. Zu jeder Kugel sind die Ergebnisse aufgeführt, die sich einerseits aus dem Fit mit 250 Kugelflächenfunktionen (Abschnitt 3.5.1) und andererseits aus der Gittersortierung (Abschnitt 3.5.2) ergeben. Die mittleren Radien stimmen für beide Auswertungsmethoden überein. Dass dies nicht in gleichem Maße auf die übrigen Werte (Minima, Maxima und P-V) zutrifft, liegt an der beschränkten Menge von einbezogenen Kugelflächenfunktionen, die lokal begrenzte extreme Topografiemerkmale nicht gut genug anpassen kann. Die größten Abweichungen sind dementsprechend tatsächlich bei den Kugeltopografien von *Si3* und *Avo28-S5* zu finden, deren Form besonders lokal ausgeprägte Strukturen aufweist (Abbildungen 3.16 und 3.17), während die „glatteste“ Kugel, *Avo3*, die geringste Abweichung hervorruft. Durch

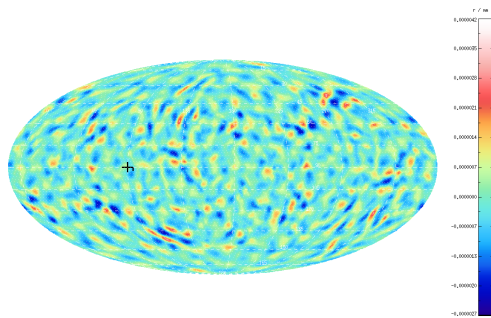


Abbildung 3.12: Darstellung der Differenz der Durchmesser-Topografien von Kugel *Avo1*, die nach den beiden Auswertungsmethoden Gittersortierung und Fit mit Kugelflächenfunktionen ($N_{SH} = 250$) entstanden sind. Die Farbskala umfasst einen Bereich von -2,4 nm bis 3,4 nm.

Verwendung einer deutlich größeren Menge an Kugelflächenfunktionen, die höhere Frequenzen repräsentieren, ließen sich verbleibende Abweichungen reduzieren, während der Mittelwert quasi gleich bleibt. Da letztere Tatsache ausreicht, um das Kugelvolumen aus dem mittleren Durchmesser berechnen zu können, lohnt sich eine Vergrößerung von N_{SH} nur dann, wenn auch die Feinstruktur der Topografie im Fitresultat enthalten sein soll. Abbildung 3.12 stellt exemplarisch für *Avo1* die Differenz zwischen der mit 250 Kugelflächenfunktionen und der mit einem Gitter aus 8412 Punkten erstellten Topografie dar. Es zeigt sich eine deutliche, noppenartige Struktur, deren laterale Größenskala größer ist als die Abstände der Gitterpunkte. Die Farbskala umfasst einen Bereich von -2,4 nm bis 3,4 nm. Die Struktur belegt die erwähnte Tatsache, dass beim Fit mit Kugelflächenfunktionen hochfrequente Topografiemerkmale verloren gehen können. Die Differenzdarstellung zeigt genau diesen hochfrequenten Anteil, der auch bei den anderen Kugeln in ähnlicher Form zu finden ist. Dass die Struktur tatsächlich eine Eigenschaft der Kugel ist und nicht etwa Ausdruck eines Effekts, der zufällig beim Experiment entsteht, lässt sich dadurch belegen, dass eine weitere Messung an *Avo1* ca. zwei Jahre später und nach einigen Veränderungen am Interferometer qualitativ dieselbe Differenzstruktur aufweist. Angaben zur Unsicherheit sind an dieser Stelle bewusst ausgelassen und werden in Abschnitt 4.1.1 ausführlich dargelegt.

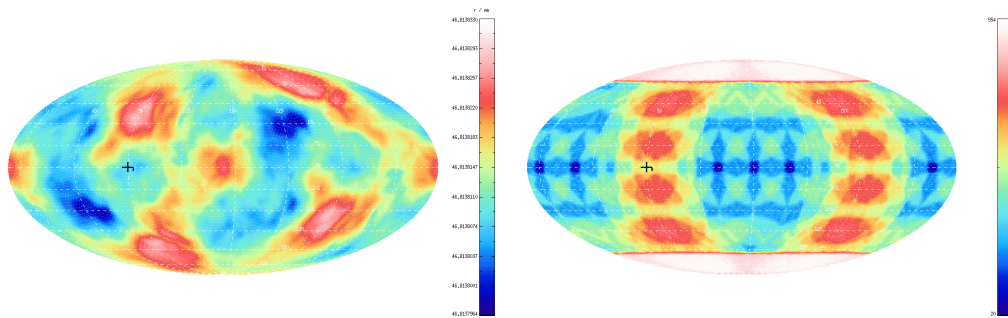


Abbildung 3.13: Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel *Avo1* und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion. Die Farbskala der Durchmessertopografie umfasst einen Bereich, der dem zugehörigen P-V-Wert aus Tabelle 3.2 entspricht.

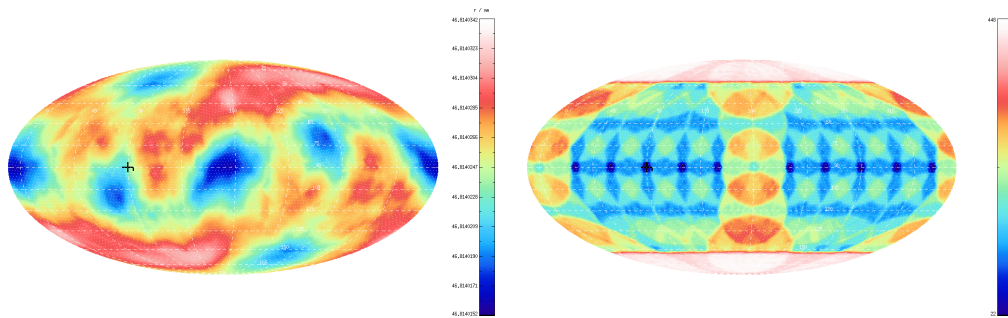


Abbildung 3.14: Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel *Avo2* und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion. Die Farbskala der Durchmessertopografie umfasst einen Bereich, der dem zugehörigen P-V-Wert aus Tabelle 3.2 entspricht.

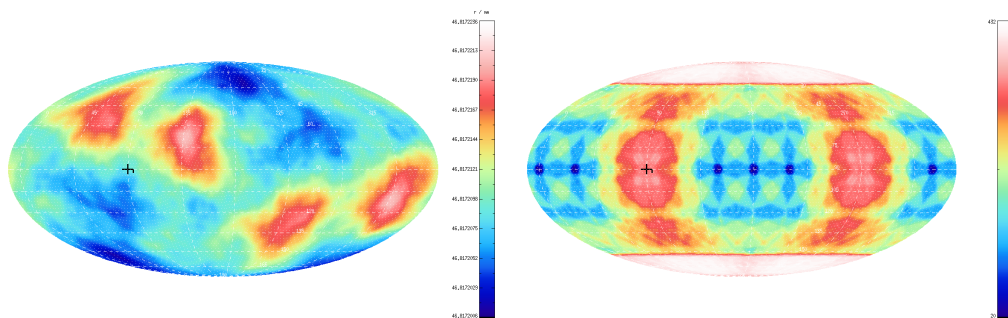


Abbildung 3.15: Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel *Avo3* und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion. Die Farbskala der Durchmessertopografie umfasst einen Bereich, der dem zugehörigen P-V-Wert aus Tabelle 3.2 entspricht.

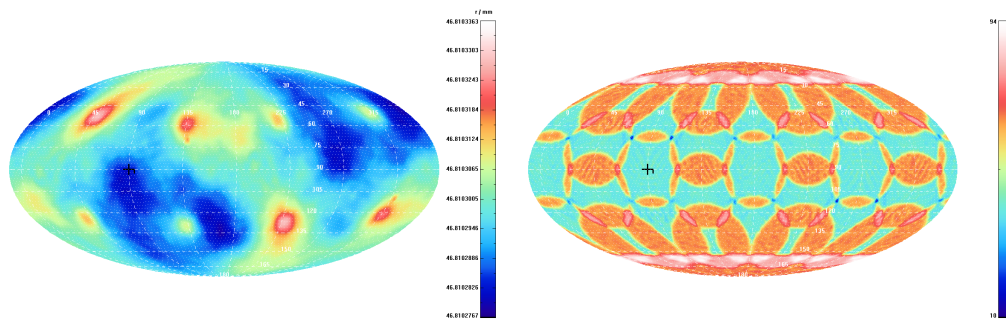


Abbildung 3.16: Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel Si3 und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion. Die Farbskala der Durchmessertopografie umfasst einen Bereich, der dem zugehörigen P-V-Wert aus Tabelle 3.2 entspricht.

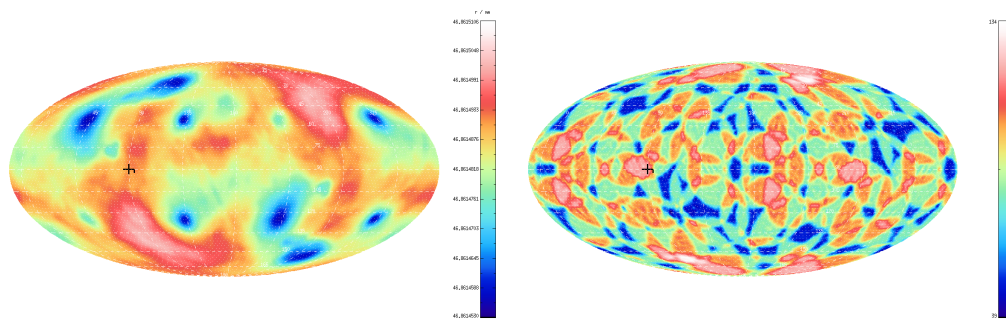


Abbildung 3.17: Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel Avo28-S5 und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion. Die Farbskala der Durchmessertopografie umfasst einen Bereich, der dem zugehörigen P-V-Wert aus Tabelle 3.2 entspricht.

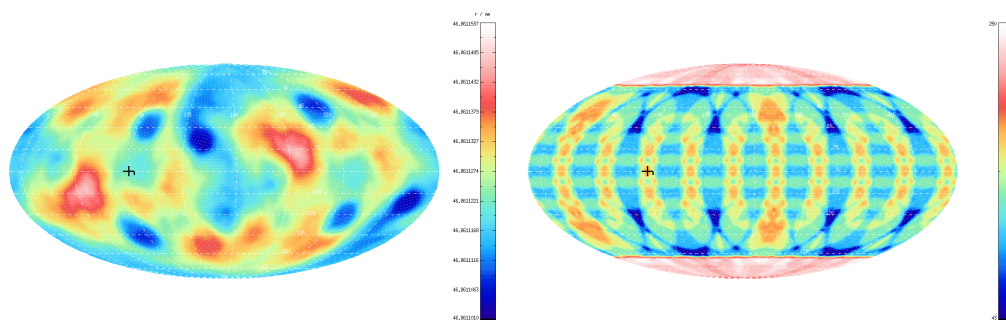


Abbildung 3.18: Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel Avo28-S8 und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion. Die Farbskala der Durchmessertopografie umfasst einen Bereich, der dem zugehörigen P-V-Wert aus Tabelle 3.2 entspricht.

4 Charakterisierung der Messgenauigkeit

4.1 Unsicherheitsbetrachtung und Reproduzierbarkeit

Um einen Ausdruck für die Genauigkeit der präsentierten Ergebnisse zu bekommen, folgt im nächsten Unterabschnitt zunächst die Angabe eines exemplarischen Unsicherheitsbudgets. Zusätzlich werden im zweiten Unterabschnitt einige Ergebnisse für die Ermittlung der Reproduzierbarkeit der Durchmessermessungen auf der Basis von Serien wiederholter Messungen vorgestellt.

4.1.1 Unsicherheitsbudget

Die Grundlage für die Bewertung der Messunsicherheit nach dem „Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement“ (GUM) [70] (frei verfügbar als [71]) bildet ein Modell in Form eines funktionalen Zusammenhangs zwischen der zu bestimmenden Größe Y und den Eingangsgrößen X_i :

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_N) . \quad (4.1)$$

Das Modell soll dem Messprozess entsprechen und alle Einflussgrößen samt deren bekannten oder geschätzten Unsicherheiten $u(x_i)$ enthalten. Die kombinierte Standardmessunsicherheit der zu bestimmenden Größe Y lautet dann:

$$u_c(y) = \sqrt{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 u^2(x_i)} . \quad (4.2)$$

Die darin enthaltenen partiellen Ableitungen der Modellgleichung nach den Eingangsgrößen werden auch als Sensitivitätskoeffizienten bezeichnet und geben an, wie stark sich kleine Änderungen im Wert einer Eingangsgröße auf die Ausgangsgröße auswirken.

Für die Durchmessermessungen muss ein solches Modell den in den Abschnitten 2.2 und 3.3 beschriebenen Auswertungsvorgang nachbilden. Als Eingangsgrößen für eine komplette Durchmesserbestimmung sind also insgesamt 20 Intensitätswerte und die zugehörigen Frequenzen notwendig. Daraus ermittelt werden dann die entsprechenden Phasen, die Interferenzordnungsbruchteile und der Durchmesser mit anschließender Temperaturkorrektur. Als Hilfsmittel für die Durchführung der Unsicherheitsberechnung wird die

Software „GUM Workbench“ [72] verwendet. Diese berechnet nicht nur die Unsicherheit selbst, sondern stellt tabellarisch ein übersichtliches Budget auf, das eine Bewertung aller im Modell auftauchenden Größen ermöglicht. Aufgeführt werden die Eingangsgrößen der Modellgleichungen, die zugehörigen Standardmessunsicherheiten, die Sensitivitätskoeffizienten und die zur Bewertung wichtigste Größe, der Beitrag zur kombinierten Standardmessunsicherheit.

Um die Unsicherheitsberechnung exemplarisch durchzuführen, wurden zunächst die Intensitäten $I_{1,K1}$, $I_{2,K1}$, usw. nach Gleichung (2.1) für die Messungen mit Kugel und ohne Kugel bestimmt. Die Vorgabe wurde dabei mit $\frac{7}{16}\pi$ so gewählt, dass die „gemessene Phase“ in der Nähe von $\pi/2$ liegt, damit die Intensitäten einigermaßen gleichmäßig zur Unsicherheit beitragen. Die 16-Bit-Kamera erlaubt einen Wertebereich von 0 bis 65535 (Einheit Zahl) und die verwendeten Reflexionskoeffizienten der Objektiv-Referenzfläche und der Siliziumkugeloberfläche betragen 4 % bzw. 34,84 % [73]. Als Unsicherheit für die Intensitäten wurde der Wert 200 großzügig abgeschätzt, wobei die Abschätzung auf der Differenz von direkt nacheinander durchgeführten Aufnahmen beruht. Für die Angaben zu den Laserfrequenzen wurden – neben den aus [42] entnommenen Angaben für f_1 – typische Werte verwendet, die während der realen Messung vorkommen. So ist $f_{\text{offset}} = 144\text{ MHz}$ mit der als Unsicherheit angegebenen beobachteten Schwankung von 0,5 MHz. Für die Frequenzschritte bei den Messungen mit Kugel sind 1,25 GHz und bei den Messungen des leeren Etalons 248 MHz gewählt. Die abgeschätzte Unsicherheit von 400 kHz beruht in diesem Fall auf der beobachteten Schwankung während der Messung. Willkürlich auf 0 Hz gesetzt sind die Startfrequenzen, um die Interferenzordnungskorrekturen $IO_{\delta I}$ kleiner als 1 zu halten, und die Linienbreite des Diodenlasers findet in der angegebenen Unsicherheit von 2 MHz Ausdruck. Für die Berücksichtigung der Temperaturkorrektur auf 20 °C wurde zusätzlich eine typische Abweichung von 2 mK angesetzt, wobei die Temperaturmessung auf 1 mK genau stattfindet. Die außerdem notwendigen Ausdehnungskoeffizienten sind samt Unsicherheiten [50] entnommen. Der Vorwert ganzzahliger Interferenzordnungen ist mit $IO_{\text{Vorwert}} = 296125000$ so gewählt, dass der hier resultierende Kugeldurchmesser in der Größenordnung der für die Kugeln aus ^{28}Si gefundenen Durchmesser liegt. Das gesamte Unsicherheitsbudget mit allen soeben genannten Größen und den daraus berechneten Zwischenergebnissen ist in Tabelle 4.1 übersichtlich dargestellt.

Resultierend aus den gewählten Eingangsgrößen ergibt sich der Kugeldurchmesser $d = 93,7222874\text{ mm}$ mit einer kombinierten Standardmessunsicherheit $u_c(d) = 0,5\text{ nm}$. Dies entspricht einer relativen Unsicherheit von rund $5 \cdot 10^{-9}$. Aus den Unsicherheitsbeiträgen ist zu entnehmen, dass die wesentlichen Anteile durch die Kontrolle der Laserfrequenzen und der Temperatur entstehen. Es ist allerdings zu bedenken, dass einige – nur

	Größe	Wert	Standardmessunsicherheit	Sensitivitätskoeffizient	Unsicherheitsbeitrag	
Frequenz der Jod-F-Linie	$f_{\text{Jod,F}}$	$473,6123536040 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$	10000 Hz	$-2 \cdot 10^{-16}$	$-2,0 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	0,0 %
Frequenzabstand zwischen Jod-I-Linie und Jod-F-Linie	$f_{\text{Jod},\Delta(I,F)}$	$-138,89200 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	5000 Hz	$-3,1 \cdot 10^{-16}$	$-1,5 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	0,0 %
Frequenz der Jod-I-Linie	f_I	$473,6122147120 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$	11200 Hz			
Wellenlänge der Jod-I-Linie	λ_I	$632,9913982102 \cdot 10^{-9} \text{ m}$	$14,9 \cdot 10^{-18} \text{ m}$			
Vakuumlichtgeschwindigkeit	c_{licht}	$299,792458 \cdot 10^6 \text{ m/s}$				
Intensität	$I_{1,K1}$	15204	200	$310 \cdot 10^{-15}$	$62 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	1,6 %
Intensität	$I_{2,K1}$	5810	200	$-410 \cdot 10^{-15}$	$-82 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	2,8 %
Intensität	$I_{3,K1}$	51593	200	$-660 \cdot 10^{-15}$	$-130 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	7,3 %
Intensität	$I_{4,K1}$	60288	200	$450 \cdot 10^{-15}$	$89 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	3,4 %
Intensität	$I_{5,K1}$	15204	200	$310 \cdot 10^{-15}$	$62 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	1,6 %
Intensität	$I_{1,K2}$	15204	200	$310 \cdot 10^{-15}$	$62 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	1,6 %
Intensität	$I_{2,K2}$	5810	200	$-410 \cdot 10^{-15}$	$-82 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	2,8 %
Intensität	$I_{3,K2}$	51593	200	$-660 \cdot 10^{-15}$	$-130 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	7,3 %
Intensität	$I_{4,K2}$	60288	200	$450 \cdot 10^{-15}$	$89 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	3,4 %
Intensität	$I_{5,K2}$	15204	200	$310 \cdot 10^{-15}$	$62 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	1,6 %
Intensität	$I_{1,E1}$	14635	200	$-160 \cdot 10^{-15}$	$-32 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	0,4 %
Intensität	$I_{2,E1}$	5554	200	$210 \cdot 10^{-15}$	$42 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	0,8 %
Intensität	$I_{3,E1}$	51044	200	$320 \cdot 10^{-15}$	$64 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	1,7 %
Intensität	$I_{4,E1}$	60044	200	$-210 \cdot 10^{-15}$	$-43 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	0,8 %
Intensität	$I_{5,E1}$	14635	200	$-160 \cdot 10^{-15}$	$-32 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	0,4 %
Intensität	$I_{1,E2}$	14635	200	$-160 \cdot 10^{-15}$	$-32 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	0,4 %
Intensität	$I_{2,E2}$	5554	200	$210 \cdot 10^{-15}$	$42 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	0,8 %
Intensität	$I_{3,E2}$	51044	200	$320 \cdot 10^{-15}$	$64 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	1,7 %
Intensität	$I_{4,E2}$	60044	200	$-210 \cdot 10^{-15}$	$-43 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	0,8 %
Intensität	$I_{5,E2}$	14635	200	$-160 \cdot 10^{-15}$	$-32 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	0,4 %
Phase K1 1...4	$\phi_{K1,1...4}$	$1,37443 \text{ rad}$	$4,32 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Phase K1 2...5	$\phi_{K1,2...5}$	$2,94523 \text{ rad}$	$4,32 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Phase K2 1...4	$\phi_{K2,1...4}$	$1,37443 \text{ rad}$	$4,32 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Phase K2 2...5	$\phi_{K2,2...5}$	$2,94523 \text{ rad}$	$4,32 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Phase E1 1...4	$\phi_{E1,1...4}$	$1,37445 \text{ rad}$	$4,32 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Phase E1 2...5	$\phi_{E1,2...5}$	$2,94524 \text{ rad}$	$4,32 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Phase E2 1...4	$\phi_{E2,1...4}$	$1,37445 \text{ rad}$	$4,32 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Phase E2 2...5	$\phi_{E2,2...5}$	$2,94524 \text{ rad}$	$4,32 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Frequenzoffset zwischen Jod- und Offset-Laser	f_{offset}	$144,000 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	$500 \cdot 10^3 \text{ Hz}$	$-1,1 \cdot 10^{-16}$	$-56 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	1,3 %
Startfrequenz	$f_{\text{start,K1}}$	0,0 Hz	$2,00 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	$3,7 \cdot 10^{-17}$	$73 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	2,3 %
Frequenzschrittgröße	$f_{\text{schrift,K1}}$	$1,250000 \cdot 10^9 \text{ Hz}$	$400 \cdot 10^3 \text{ Hz}$	$-1,5 \cdot 10^{-19}$	$-60 \cdot 10^{-15} \text{ m}$	0,0 %
Startfrequenz	$f_{\text{start,K2}}$	0,0 Hz	$2,00 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	$3,7 \cdot 10^{-17}$	$73 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	2,3 %
Frequenzschrittgröße	$f_{\text{schrift,K2}}$	$1,250000 \cdot 10^9 \text{ Hz}$	$400 \cdot 10^3 \text{ Hz}$	$-1,5 \cdot 10^{-19}$	$-60 \cdot 10^{-15} \text{ m}$	0,0 %
Startfrequenz	$f_{\text{start,E1}}$	0,0 Hz	$2,00 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	$-9,2 \cdot 10^{-17}$	$-180 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	14,3 %
Frequenzschrittgröße	$f_{\text{schrift,E1}}$	$248,000 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	$400 \cdot 10^3 \text{ Hz}$	$1,9 \cdot 10^{-18}$	$760 \cdot 10^{-15} \text{ m}$	0,0 %
Startfrequenz	$f_{\text{start,E2}}$	0,0 Hz	$2,00 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	$-9,2 \cdot 10^{-17}$	$-180 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	14,3 %
Frequenzschrittgröße	$f_{\text{schrift,E2}}$	$248,000 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	$400 \cdot 10^3 \text{ Hz}$	$1,9 \cdot 10^{-18}$	$760 \cdot 10^{-15} \text{ m}$	0,0 %
Frequenzdifferenz zwischen Messfrequenz und Jod-I-Linie	$\delta f_{\text{mess,K1}}$	$1,88011 \cdot 10^9 \text{ Hz}$	$2,15 \cdot 10^6 \text{ Hz}$			
"	$\delta f_{\text{mess,K2}}$	$1,88011 \cdot 10^9 \text{ Hz}$	$2,15 \cdot 10^6 \text{ Hz}$			
"	$\delta f_{\text{mess,E1}}$	$377,11 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	$2,15 \cdot 10^6 \text{ Hz}$			
"	$\delta f_{\text{mess,E2}}$	$377,11 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	$2,15 \cdot 10^6 \text{ Hz}$			
Interferenzordnungsbruchteil als Korrektur zur Jod-I-Linie	$IO_{\delta I,K1}$	0.376022	$412 \cdot 10^{-6}$			
"	$IO_{\delta I,K2}$	0.376022	$412 \cdot 10^{-6}$			
"	$IO_{\delta I,E1}$	0.38015	$2,08 \cdot 10^{-3}$			
"	$IO_{\delta I,E2}$	0.38015	$2,08 \cdot 10^{-3}$			
Phase K1	ϕ_{K1}	$5,11 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$	$4,23 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Phase K2	ϕ_{K2}	$5,11 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$	$4,23 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Phase E1	ϕ_{E1}	$-9,90 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$	$8,53 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Phase E2	ϕ_{E2}	$-9,90 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$	$8,53 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Durchmesserabweichung ganzzahliger Interferenzordnungs-vorwert	ϕ_d	-0,02013 rad	$8,45 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$			
Abweichung von 20 °C	ΔT	$2,00 \cdot 10^{-3} \text{ K}$	$1,00 \cdot 10^{-3} \text{ K}$	$-240 \cdot 10^{-9}$	$-240 \cdot 10^{-12} \text{ m}$	24,0 %
Ausdehnungskoeffizient	$\alpha_{0,\text{nat}}$	$2,555400 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	$200 \cdot 10^{-12} \text{ K}^{-1}$	$-190 \cdot 10^{-6}$	$-37 \cdot 10^{-15} \text{ m}$	0,0 %
Ausdehnungskoeffizient	$\alpha_{1,\text{nat}}$	$4,5800 \cdot 10^{-9} \text{ K}^{-2}$	$40,0 \cdot 10^{-12} \text{ K}^{-2}$	$-370 \cdot 10^{-9}$	$-15 \cdot 10^{-18} \text{ m}$	0,0 %
Kugeldurchmesser	$d_{\text{mess},20^\circ\text{C}}$	0,093722287405 m	$489 \cdot 10^{-12} \text{ m}$			

Tabelle 4.1: Exemplarisches Unsicherheitsbudget. Alle aufgeführten Messunsicherheiten wurden normalverteilt angenommen und mit dem Erweiterungsfaktor $k = 1$ versehen.

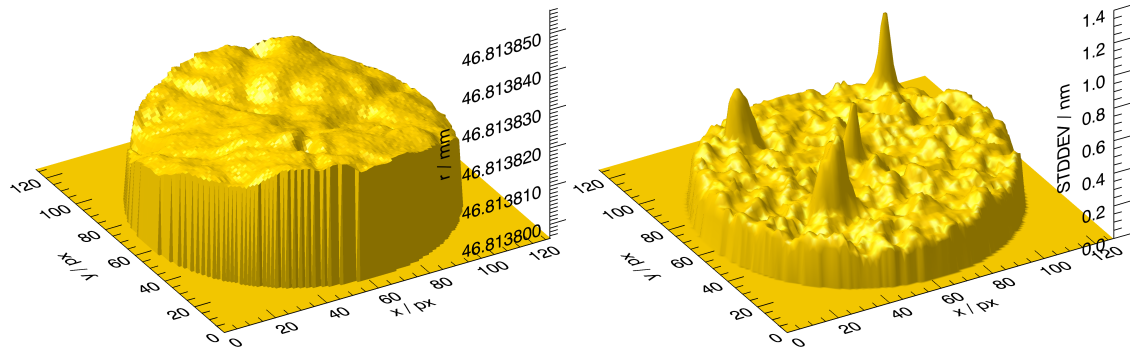
schwer abschätzbare – Effekte im vorgestellten Budget nicht untergebracht sind. So würde zum Beispiel eine Fehlbestimmung von ϕ_d , die nur 1 nm entspricht, dazu führen, dass sich die kombinierte Standardmessunsicherheit auf rund 1 nm verdoppelt und die Fehlbestimmung rund 80 % Unsicherheitsbeitrag erhält, während die in Tabelle 4.1 dominant beitragenden Größen vernachlässigbar werden. Für eine solche mögliche Fehlbestimmung verantwortliche Effekte können zum Beispiel sein: Störinterferenzen, Beugung, „retrace error“ [74] auf Grund der Abweichungen der Topografien der Objektiv-Referenzflächen oder der Kugel von der ideal sphärischen Form, Dejustierung des optischen Strahlengangs.

Aus diesem Grund stellt das hier angegebene Unsicherheitsbudget zunächst nur eine Abschätzung dar, wie genau die Ergebnisse unter Vorgabe der bekannten Größen im besten Fall sein können, solange nicht alle experimentellen Einflussfaktoren hinreichend berücksichtigt sind.

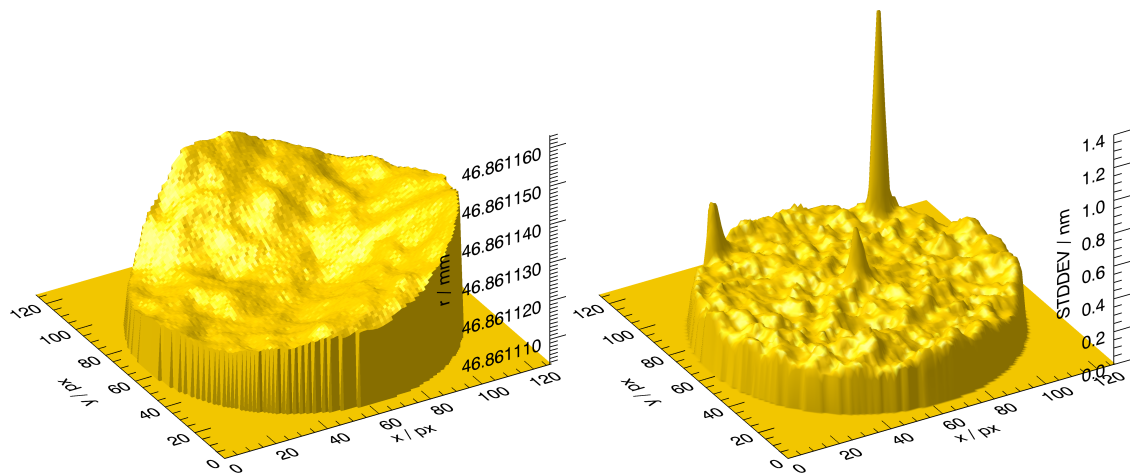
4.1.2 Messungen zur Reproduzierbarkeit

Um die Reproduzierbarkeit der Durchmessermessungen am Kugelinterferometer abschätzen zu können, bietet sich die Möglichkeit, aus den zu verschiedenen Zwecken aufgenommenen Datensätzen Serien von wiederholten Messungen heranzuziehen. Eine „Serie“ besteht dabei aus mehreren Messungen eines Topografiesegments, die innerhalb eines kurzen Zeitraums von ein oder zwei Tagen durchgeführt wurden. Während der Messungen wurden keine Änderungen am Interferometer durchgeführt und die Kugel nur für den Messablauf hoch- und wieder heruntergefahren, so dass alle Einzelmessungen unter gleichartigen Versuchsbedingungen stattfanden.

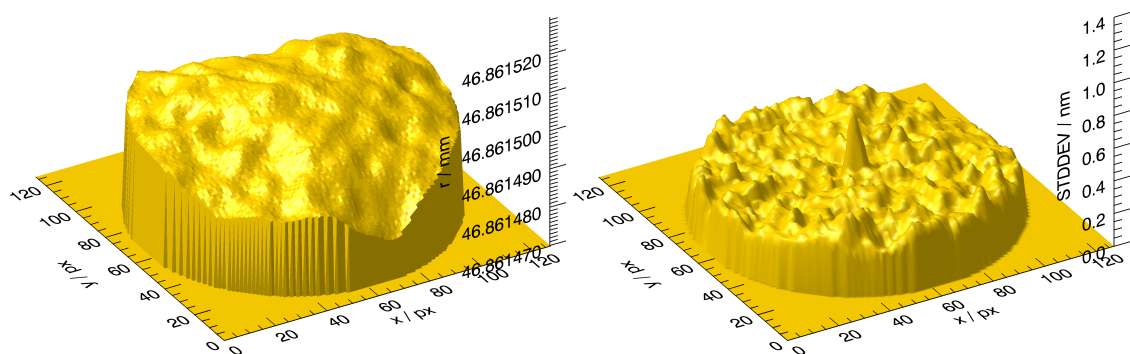
Zu jedem einzelnen der rund 10000 Pixel im Sichtfeld kann der Mittelwert und die Standardabweichung über alle Messungen einer Serie ermittelt werden. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.1 für drei Serien von Messungen an den Kugeln *Avo1*, *Avo28-S8* und *Avo28-S5* dargestellt, wobei acht, elf und sieben Einzelmessungen zu Grunde liegen. Die Mittelwerte aller Pixel ergeben jeweils eine gemittelte Topografie des gemessenen Topografiesegments, das in den vorliegenden Fällen eine Radiusdynamik von rund 20 bis 25 nm aufweist. Die pixelweise Standardabweichung ist ein Maß für die Reproduzierbarkeit der Messungen. Auffallend sind die hervorstechenden Peaks, die jeweils unterschiedlich ausgeprägt sind. Als Ursache dafür können Störreflexe verantwortlich gemacht werden, die in der Topografie selbst nicht ins Auge fallen. Eine komplette Neujustierung des Interferometers zwischen den Messungen an *Avo28-S8* und *Avo28-S5* sorgte für eine erkennbare Verminderung der Störreflexe. Die RMS-Abweichungen der Standardabweichungen innerhalb des Kreissegments betragen für die drei angegebenen Serien 0,28 nm,



(a) Serien-Mittelwert und -Standardabweichung eines Topografie-segments von Avo1



(b) Serien-Mittelwert und -Standardabweichung eines Topografie-segments von Avo28-S8



(c) Serien-Mittelwert und -Standardabweichung eines Topografie-segments von Avo28-S5

Abbildung 4.1: Ergebnisse zur Reproduzierbarkeit

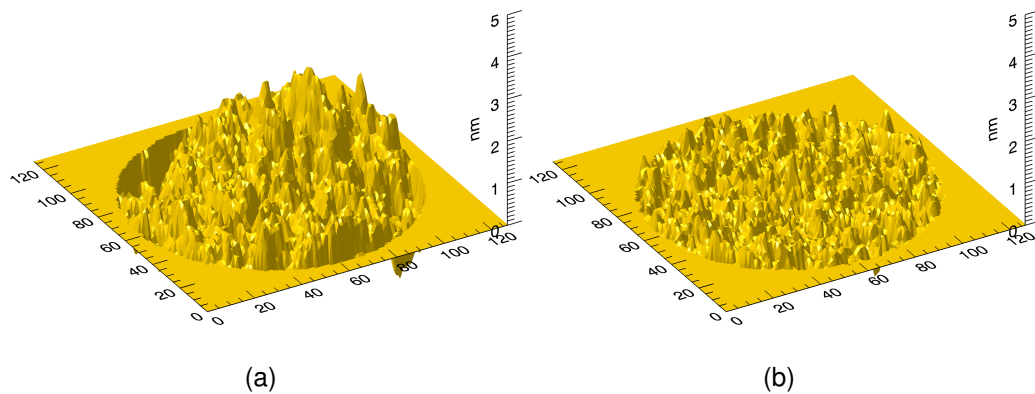


Abbildung 4.2: Differenz zweier Messungen eines Topografiesegments von Avo28-S8 mit einem Zeitabstand von (a) einem Jahr (P-V: 3,84 nm) und (b) zwei Stunden (P-V: 1,83 nm).

0,30 nm und 0,28 nm. In Anbetracht der Tatsache, dass zwischen den Messungen an Avo1 und Avo28-S8 vier Monate und zwischen den Messungen an Avo28-S8 und Avo28-S5 acht Monate liegen und im letztgenannten Zeitraum das Interferometer komplett zerlegt und neu justiert wurde, weisen die nicht nennenswert voneinander abweichenden Werte auf eine gute Wiederholbarkeit der Messungen am Kugelinterferometer hin. Hinzu kommt, dass direkte Differenzbetrachtungen von Messungen des Topografiesegments von Avo28-S8, die vor und nach der Neujustierung durchgeführt wurden und ca. ein Jahr auseinander liegen, lediglich eine mittlere Differenz von rund 0,1 nm mit der RMS-Abweichung von 0,72 nm aufweisen (Abbildung 4.2). Die Differenz bei einem Zeitabstand von ca. zwei Stunden beträgt 0,05 nm mit der RMS-Abweichung von 0,33 nm. Die vergleichsweise großen „Peak-to-Valley (P-V)“-Werte von 3,84 nm bzw. 1,83 nm sind durch den Einfluss der Störreflexe begründet.

4.2 Einfluss der Messpunktverteilung auf den mittleren Durchmesser

Weil die zu messenden Kugeln nicht perfekt sphärisch sind, sondern eine topografische Abweichung bis zu einigen 10 nm vom mittleren Durchmesser haben, ist es notwendig, die Oberfläche mit einer Mindestanzahl von Messpositionen abzutasten. Anderenfalls würde es bei Verwendung eines der Gitter aus Abschnitt 3.5.2 mit nur wenigen Vertizes dazu kommen, dass der ermittelte Durchmesser abhängig von der Orientierung des Gitters wäre. Im Folgenden wird dieser Aspekt an Hand einiger Kugeltopografien mit unterschiedlichen Gittern und variierenden Orientierungen untersucht. Damit kann außerdem eine wichtige Frage beantwortet werden: Wie viele Messwerte sind notwendig,

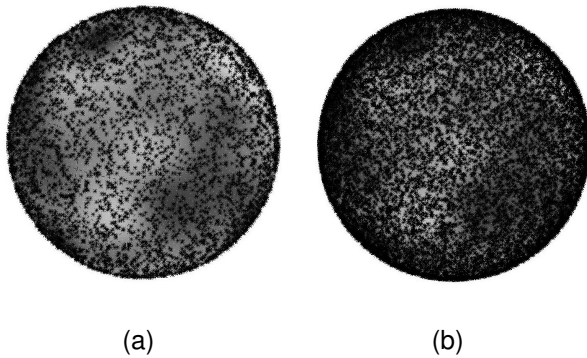


Abbildung 4.3: Akkumulierte Vertexpositionen von einem Gitter mit (a) 92 Vertices und (b) 252 Vertices nach 100 zufälligen Rotationen. Die durchscheinende Topografie ist von Kugel Avo28-S8.

um den mittleren Kugeldurchmesser genau genug angeben zu können?

4.2.1 Untersuchung mit gemessenen Topografien

Grundlage für die nun beschriebenen Untersuchungen bildet jeweils die Gesamtmenge aller gemessenen Einzeldurchmesser einer Kugel. Um daraus eine kontinuierliche Funktion zu erhalten, wird an die Messwerte jeder Kugel gemäß Gleichung (3.31) aus Abschnitt 3.5.1 ein Satz von Kugelflächenfunktionen angepasst. Jede Topografie ist dabei durch rund 120 Parameter beschrieben, so dass lediglich in Regionen mit feinen Strukturen (z. B. „Löcher“) kleine Abweichungen im nm-Bereich vorkommen. Das ist für das Hauptaugenmerk dieses Abschnitts jedoch nicht von Bedeutung. Um den mittleren Durchmesser einer angepassten Topografie zu ermitteln, wird ein Gitter mit einer bestimmten Anzahl von Vertices gewählt, die als simulierte Messpositionen dienen. Die jeweiligen Durchmesserwerte an diesen Messpositionen können dann mit dem vorher erhaltenen Parametersatz $k_{\ell m}$ nach Gleichung (3.31) berechnet werden. Den mittleren Durchmesser bei gegebener Anzahl simulierter Messpositionen erhält man schließlich aus dem Mittelwert der berechneten Einzeldurchmesser. Um den Einfluss der Orientierung des zu Grunde liegenden Gitters zu untersuchen, wird diese Prozedur 10000 Mal mit einem jeweils um zwei Achsen zufällig rotierten Gitter wiederholt. Abbildung 4.3 zeigt exemplarisch die resultierenden Vertexpositionen von zwei ausgewählten Gittern akkumuliert nach den ersten 100 Rotationsvorgängen. Die Bilder dienen als Beispiel dafür, dass die verwendeten Zufallsrotationen geeignet sind, um die gesamte Oberfläche abzudecken, ohne die Vertices markante Cluster bilden zu lassen.

So lange die Topografie keiner perfekten Sphäre entspricht und eine unzureichende Anzahl von simulierten Messpositionen verwendet wird, resultiert aus jedem wiederholten Durchlauf ein mittlerer Durchmesser, der sich im Allgemeinen von denen der anderen Durchläufe unterscheidet. Als Beispiel dafür sind in Abbildung 4.4 die mittleren Durch-

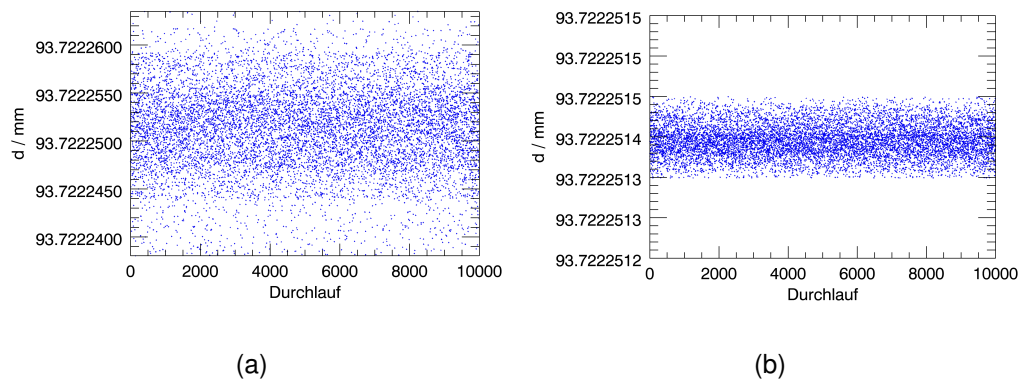


Abbildung 4.4: Mittlere Durchmesser von 10000 zufälligen Rotationen eines Gitters mit (a) 12 Vertizes und (b) 252 Vertizes. Man beachte die unterschiedliche Skalierung der y-Achse.

messer der Topografie von Kugel *Avo28-S8* von 10000 Durchläufen mit unterschiedlicher Gitterrotation dargestellt. Im Fall weniger Vertizes (Abbildung 4.4(a)) ergeben sich Werte, die um mehr als 20 nm variieren, während bei Hinzuziehen einer größeren Vertexanzahl (Abbildung 4.4(b)) die Variation zwei Größenordnungen niedriger liegt. Es ist also wie erwartet zu erkennen, dass viele Vertizes die Topografie besser abtasten als wenige, so dass die Orientierung einen geringeren Einfluss auf die resultierenden Werte hat.

Um diesen Effekt quantifizieren zu können, wird in jeder Folge von 10000 Durchläufen für die verschiedenen Gitter die Differenz zwischen dem minimalen und dem maximalen auftretenden Durchmesserwert $\Delta(\max, \min)$ ermittelt. In Abbildung 4.5 sind diese Differenzen gegen die jeweilige Anzahl zu Grunde liegender Durchmesserwerte – also die halbe Vertexanzahl – für unterschiedliche Kugeltopografien aufgetragen¹. Weil sich die Differenzwerte schon bei den ersten verwendeten Gittern sehr stark verringern, ist die y-Achse logarithmisch skaliert, um den im Idealfall gegen 0 nm konvergierenden Verlauf besser erkennen zu können. Der unterschiedliche Offset bei den Ergebnissen verschiedener Kugeln ist dadurch begründet, dass, wie aus Abschnitt 3.6 zu entnehmen ist, die Amplituden der Topografien unterschiedlich stark ausgeprägt sind. So ist der Offset einer Kugel mit geringer Amplitude (z. B. rund 20 nm bei *Avo2*) kleiner als bei einer Kugel mit größerer Amplitude (z. B. rund 50 nm bei *Avo28-S5*). Dies stimmt auch mit den Ergebnissen aus Abschnitt 4.2.2 überein.

Aus Abbildung 4.5 kann schließlich auch abgelesen werden, wie viele Messwerte notwendig sind, um den mittleren Durchmesser einer Kugel ausreichend genau angeben zu können. Geht man von dem Ziel aus, eine Messunsicherheit von weniger als 0,3 nm erreichen zu wollen, dann muss ein Gitter mit mindestens 252 Vertizes – das entspricht 126

¹Die in [75] aufgeführten Topografien werden hier noch um die der Kugel *Avo28-S5* erweitert.

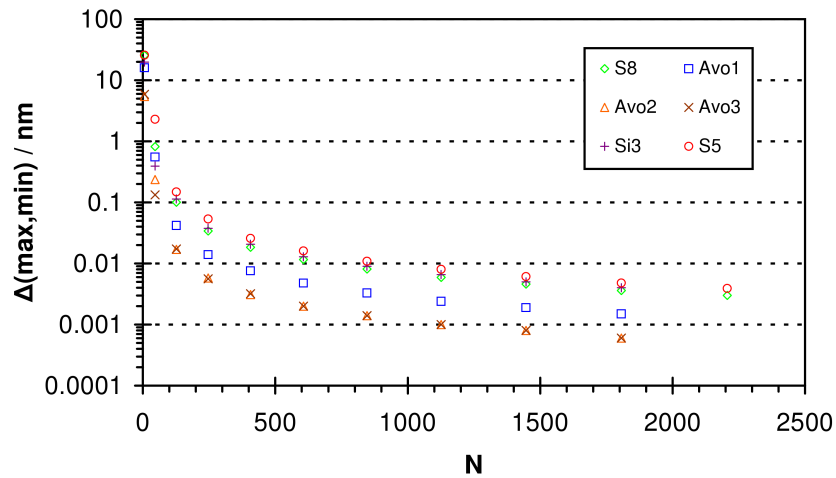


Abbildung 4.5: Differenz zwischen dem minimalen und dem maximalen auftretenden Durchmesserwert $\Delta(\max, \min)$ innerhalb von 10000 Rotationsdurchläufen aufgetragen gegen die jeweilige Anzahl zu Grunde liegender Durchmesserwerte für unterschiedliche Kugeltopografien.

Durchmessern – verwendet werden. Da in der Praxis aber noch weitere Fehlerquellen das Ergebnis beeinflussen, sollte die Menge an Messpositionen eine oder zwei Größenordnungen größer sein. Anderenfalls wäre die angestrebte Unsicherheit bereits nur durch den hier beschriebenen Effekt ausgereizt. Nimmt man ein Gitter mit einigen 1000 Vertices reduziert sich die in Abbildung 4.5 gezeigte Differenz auf weniger als 1 % eines Nanometers und kann vernachlässigt werden.

Das Kugelinterferometer der PTB liefert eine komfortabel große Anzahl von Einzelmesswerten, die es erlaubt, für die Gittersortierung zur Berechnung des mittleren Durchmessers einer üblichen Topografiemessung ein Gitter mit z. B. 8412 Vertices anzuwenden. Wenn die Anzahl überlappender Messungen groß genug ist, können auch noch feinere Gitter herangezogen werden. In der Praxis hat sich allerdings gezeigt, dass der Gewinn an Topografiedetails kaum merklich ist, so dass besagtes Gitter ein guter Kompromiss zwischen Feinheit und Fehlerminimierung darstellt.

4.2.2 Untersuchung mit simulierten Topografien

Die im vorigen Abschnitt untersuchten Zusammenhänge können auch systematisch an Hand von simulierten Kugeln mit unterschiedlichen Amplituden und Strukturgrößen – gegeben durch die Ortsfrequenzen der Oberfläche – durchgeführt werden. Zu diesem Zweck wird eine Kugeltopografie aus Kugelflächenfunktionen nach Gleichung (3.31) erzeugt, indem ein aus 120 normalverteilten Zufallszahlen $p_{\ell m}$ bestehender Parametersatz $k_{\ell m}$ generiert wird. 120 Parameter ergeben sich für $N_\ell = 14$ unter der Einschränkung $\ell/2 \in \mathbb{N}$.

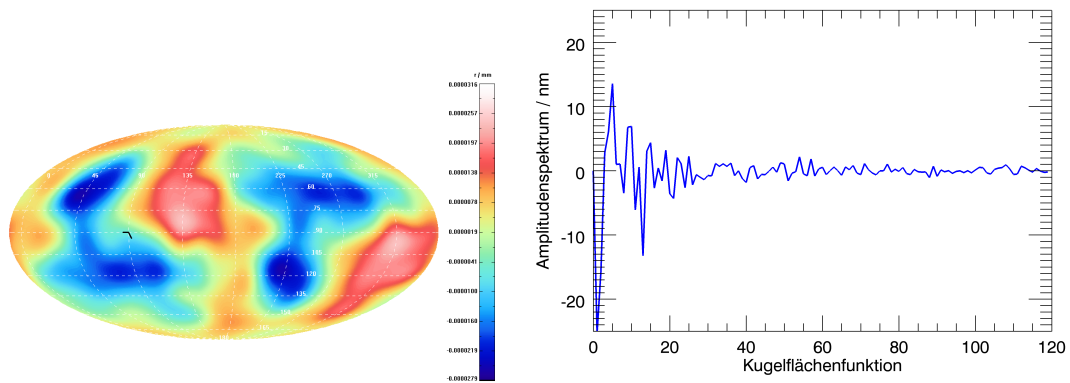
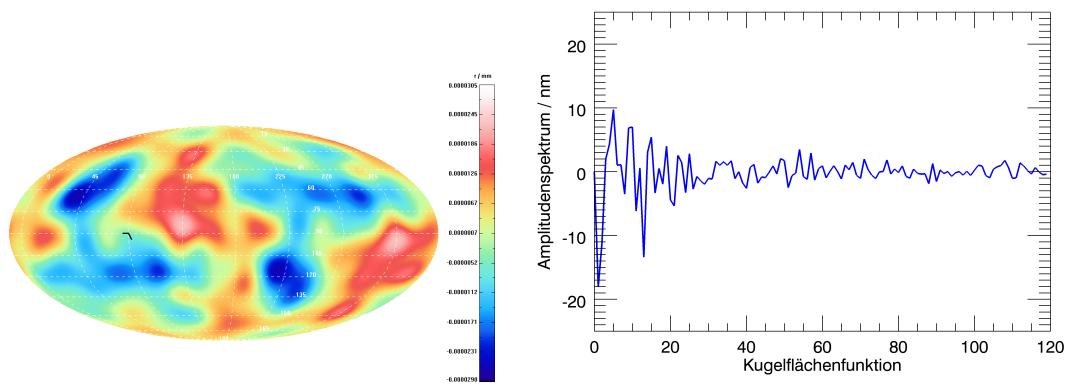
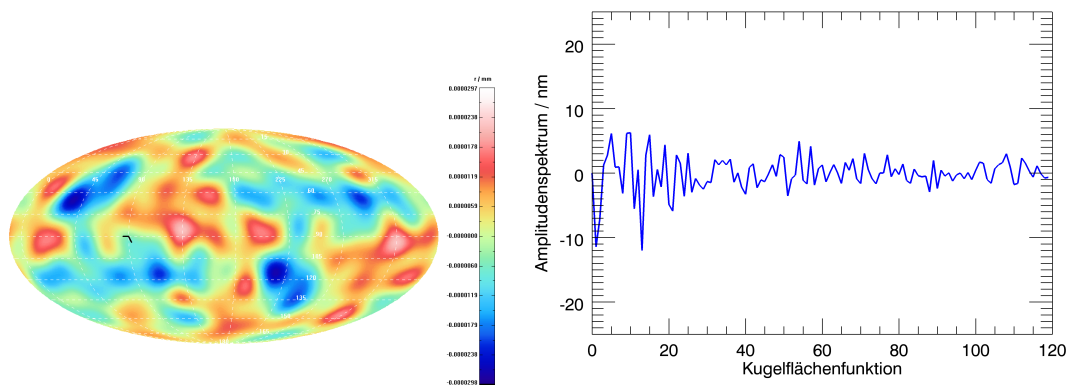
(a) $\eta_e = 2,0$ (b) $\eta_e = 1,5$ (c) $\eta_e = 1,0$

Abbildung 4.6: Mit Kugelflächenfunktionen simulierte Topografie aus 120 Parametern $k_{\ell m}$ für unterschiedliche η_e . Die Farbskala entspricht einem Wertebereich von 50 nm. Neben jeder Topografiedarstellung ist das zugehörige Amplitudenspektrum abgebildet.

Um die Topografiestruktur den real verfügbaren Kugeln ähnlich sein zu lassen, sind die Parameter mit dem Faktor $\ell^{-\eta_e}$ gewichtet: $k_{\ell m} = \ell^{-\eta_e} \cdot p_{\ell m}$. Außerdem sind die Parameter so normiert, so dass die maximale Amplitude der simulierten Topografie einem Wert η_a entspricht. Die variierebare Topografie ist damit wie folgt definiert:

$$\mathcal{R}_d(\vartheta, \varphi) = k_{00} + \eta_a \cdot \sum_{\substack{\ell=2 \\ \frac{\ell}{2} \in \mathbb{N}}}^{14} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (\ell^{-\eta_e} \cdot p_{\ell m}) \cdot Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi). \quad (4.3)$$

Darin sind die $k_{\ell m}$ für $\ell = 1$ ausgelassen, um die Kugel im Koordinatenursprung zentriert zu lassen. Zusätzlich kann willkürlich $k_{00} = 0$ gesetzt werden, weil ein konstanter Offset zu vernachlässigen ist, wenn es nur auf die Differenzen zwischen minimalem und maximalem Durchmesserwert ankommt. Auf dieser Basis lässt sich nun erstens die Amplitude variieren und zweitens kann die Strukturgröße über unterschiedlich gewichtete Parametersätze verändert werden.

Die aus einem Zufallszahlensatz resultierende Topografie ist für $\eta_a = 25 \text{ nm}$ und unterschiedliche Exponenten η_e in Abbildung 4.6 dargestellt. Die Farbskala umfasst einen Bereich von 50 nm. Neben den Topografien ist jeweils das zugehörige Amplitudenspektrum angegeben, worin zu erkennen ist, dass mit kleiner werdendem η_e der höherfrequente Anteil zunimmt, so dass feinere Strukturen in der Topografie enthalten sind.

Für verschiedene Werte von η_a und η_e wurde verfahren wie mit den gemessenen Topografien in Abschnitt 4.2.1. Allerdings wurden an Stelle von 10000 Rotationsdurchläufen hier nur 5000 Durchläufe durchgeführt. Zu jeder Durchlaufsequenz wurde wieder die Differenz zwischen dem maximalen und dem minimalen auftretenden Wert ermittelt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.7 in Abhängigkeit der zu Grunde liegenden Durchmesseranzahl dargestellt. An Hand der simulierten Topografien bestätigt sich der Befund aus Abschnitt 4.2.1: Je feiner die Struktur der Kugeloberfläche und je größer die Amplitude ist, desto mehr Durchmesser sind erforderlich, um den mittleren Durchmesser im Rahmen der erforderlichen Unsicherheit genau angeben zu können.

4.3 Einfluss der Position im Sichtfeld

Das Unsicherheitsbudget der Durchmessermessungen setzt sich nach Abschnitt 4.1.1 überwiegend aus den Anteilen von Interferenzphasenauswertung, Temperaturstabilisierung und Laserfrequenzeinstellung zusammen. Deren Einfluss kann jeweils separat gemessen werden. Der Einfluss der optischen Komponenten im Interferometersystem lässt sich hingegen auf Grund der speziellen Anforderungen – und der damit verbundenen hohen Kosten – nicht einfach durch Austauschen einzelner Komponenten untersuchen. Al-

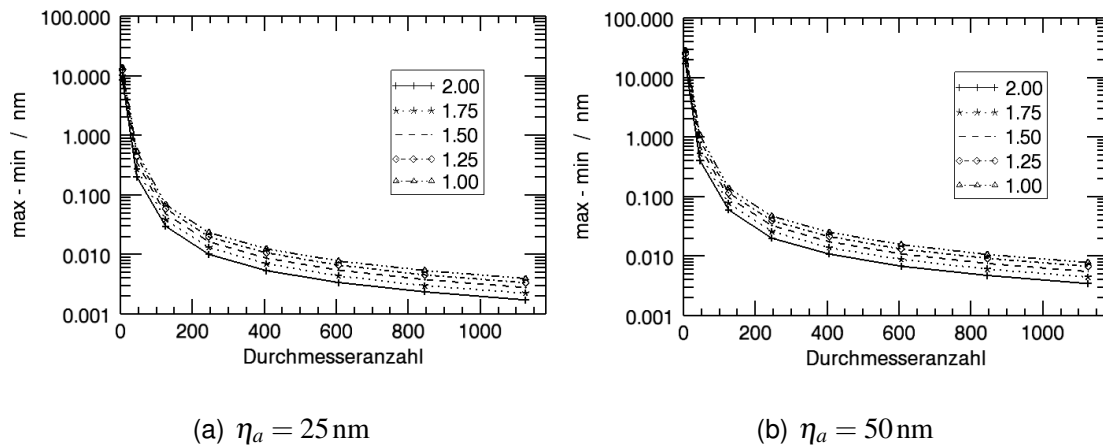


Abbildung 4.7: Differenz zwischen dem minimalen und dem maximalen auftretenden Durchmesserwert $\Delta(\max, \min)$ innerhalb von 5000 Rotationsdurchläufen aufgetragen gegen die jeweilige Anzahl zu Grunde liegender Durchmesserwerte für die simulierte Kugeltopografie mit unterschiedlichen Werten für η_a . Die Legende gibt jeweils den Wert von η_e an.

lerdings ist das Kugelinterferometer der PTB im Gegensatz zu den Interferometern vom Saunders-Typ [21], wie sie am CSIRO [19] und NMIJ [16] verwendet werden, durch das ausgedehnte Sichtfeld der Objektive ein zweidimensional messendes System. Deshalb ist es möglich, eine ausgewählte Stelle auf der Kugeloberfläche an verschiedene Positionen innerhalb des Sichtfelds zu bringen, und die jeweils entlang unterschiedlicher optischer Wege gemessenen Durchmesser zu vergleichen. Unabhängig davon ob der Durchmesser in der Mitte des Sichtfelds oder in dessen Randbereich ermittelt wird, sollte der Wert im Rahmen der Messunsicherheit immer gleich sein. Zeigt sich eine deutliche Abweichung, wäre dies ein Anzeichen für einen systematischen Einfluss der optischen Komponenten auf das Ergebnis. Die in [76] auszugsweise beschriebenen Messungen und Resultate werden im Folgenden ergänzt und detaillierter ausgeführt.

4.3.1 Messungen

Nach der Durchführung eines vorläufigen Tests [77] an *Avo3* wurden zu einem späteren Zeitpunkt detailliertere Untersuchungen und Messungen an *Avo1* unternommen. Dazu wurden zwischenzeitlich die gealterten Getriebe und Motoren der Bewegungsapparatur ausgetauscht und die Drehschritte neu kalibriert, um eine zuverlässige Positionierung der Kugel zu gewährleisten.

Für die anschließenden Messungen wurden Stellen in der Umgebung der Markierung auf der Kugel ausgewählt (vgl. Abbildung 4.8), die an verschiedene Positionen innerhalb des Sichtfelds der Objektive gebracht werden sollten. Durch eine Abfolge von Drehungen um

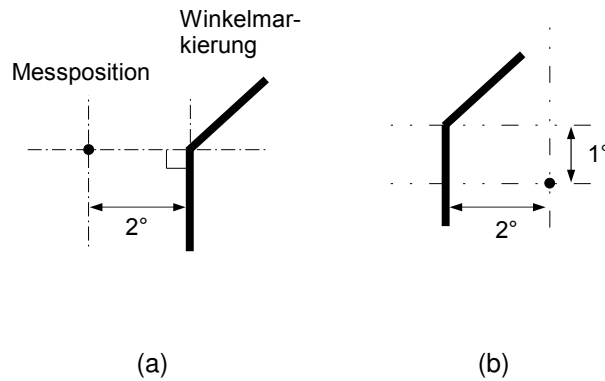


Abbildung 4.8: Position der ausgewählten Stellen für die Messungen neben der Markierung auf der Kugel.

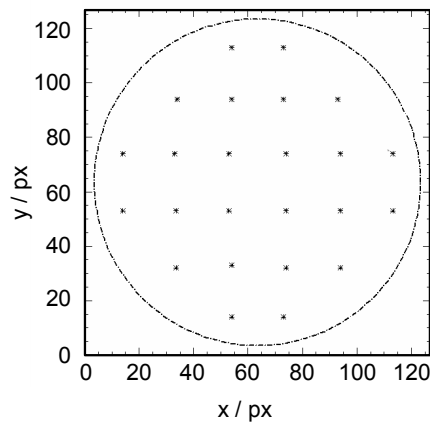


Abbildung 4.9: Schema der Zielpositionen von der ausgewählten Stelle auf der Kugel innerhalb des Sichtfelds der Objektive.

die in Abschnitt 3.4 beschriebenen Achsen wurden diese Stellen an die in Abbildung 4.9 gezeigten Zielpositionen bewegt. Das Schema ist so ausgelegt, dass das Sichtfeld sowohl im Zentrum als auch im Randbereich berücksichtigt wird. An jeder Position wurde eine übliche Durchmessermessung vollzogen.

4.3.2 Ergebnisse und Diskussion

In den ausgewerteten Durchmesserdatensätzen kann über die Koordinatenzuordnung aus Abschnitt 3.4 die jeweilige Pixelposition bestimmt werden, an der sich eine bestimmte Stelle der Kugel im Sichtfeld befindet. Abbildung 4.10 zeigt exemplarisch Topografieausschnitte an den oberen sechs Zielpositionen aus Abbildung 4.9. Im Zentrum liegt mit einem Kreis markiert jeweils die ausgewählte Messposition nach Abbildung 4.8(b). Links daneben ist als blau-grüne Struktur die Winkelmarkierung und in den oberen beiden Ausschnitten zusätzlich der Rand des Objektivsichtfelds zu erkennen. Dass die relative Lage von Messposition und erkennbarer Winkelmarkierung in allen Ausschnitten gleich ist, zeigt die Genauigkeit der Positionierbewegung.

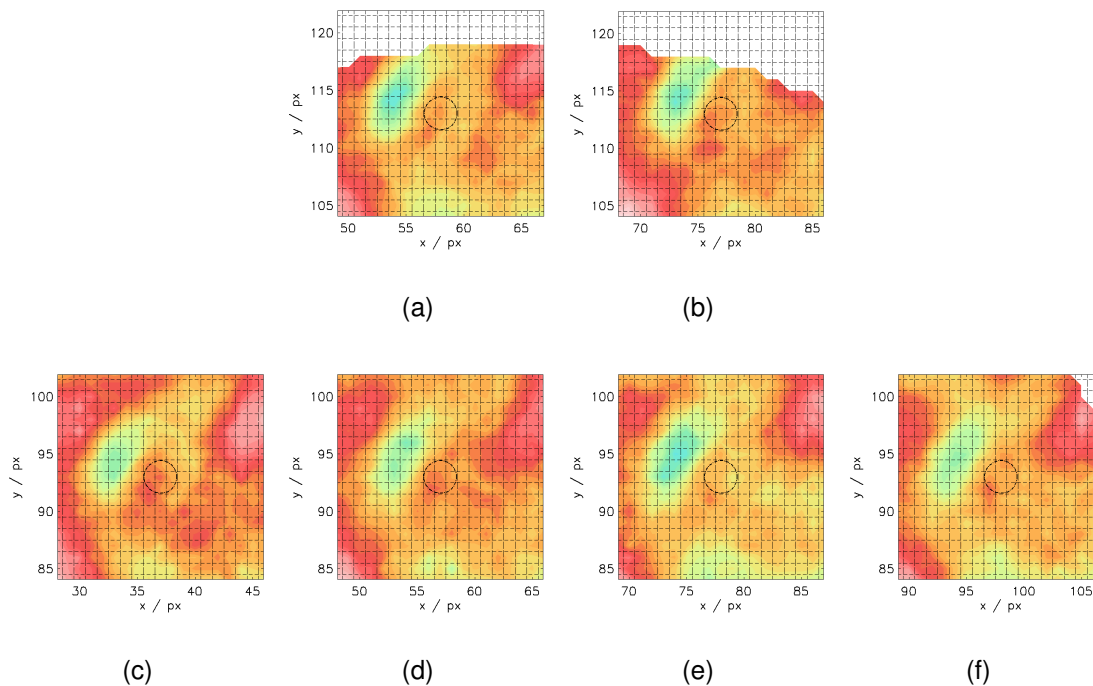
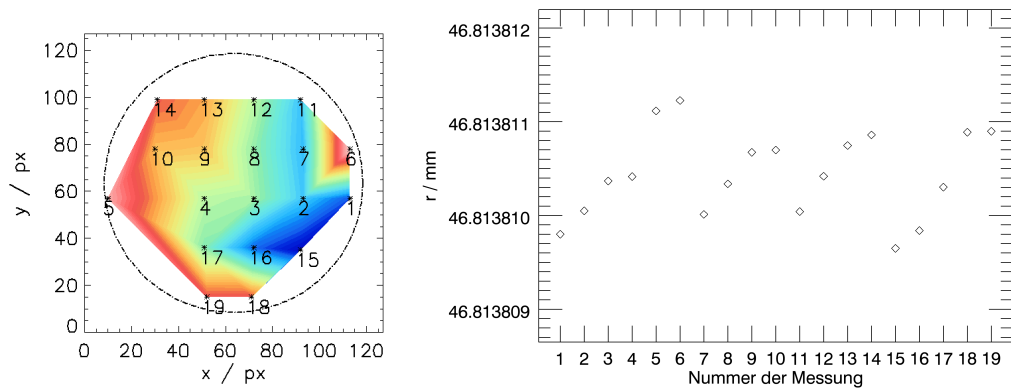


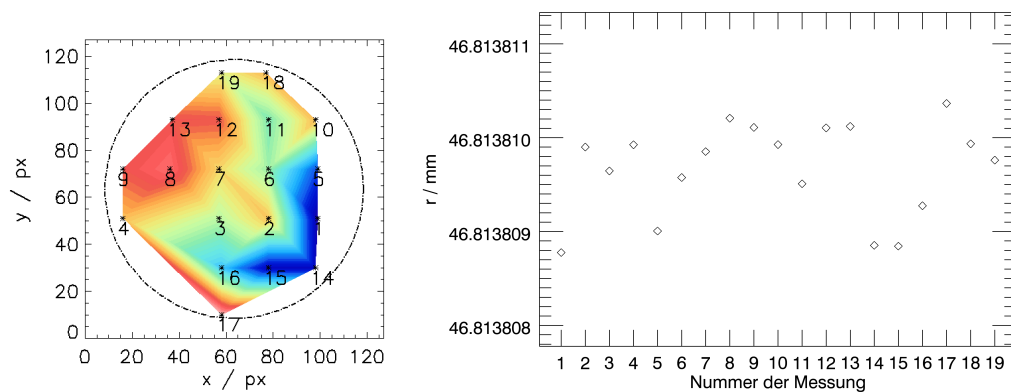
Abbildung 4.10: Exemplarische Topografieausschnitte von $17\text{px} \times 17\text{px}$ im Bereich der ausgewählten Stelle. Die Farbskala umfasst rund 10nm .

Um eine Abhängigkeit der Messwerte von der Position im Sichtfeld zu untersuchen, wurde zu jeder in Abbildung 4.9 festgelegten Position an der entsprechenden Pixelposition der ausgewählten Stelle nach Abbildung 4.8 ein Bereich von $3\text{px} \times 3\text{px}$ extrahiert und die zugehörigen Durchmesserwerte gemittelt. In Abbildung 4.11 sind die daraus erhaltenen Ergebnisse an der jeweiligen Position im Sichtfeld farblich kodiert dargestellt und in chronologischer Reihenfolge durchnummeriert. Rechts daneben sind die selben Werte nebeneinander entsprechend der Nummerierung aufgetragen. Die fehlenden Werte am Sichtfeldrand liegen außerhalb des Auswertungsbereichs und wurden daher nicht berücksichtigt. Die fehlenden Werte im linken unteren Quadranten sind absichtlich ausgelassen, weil in diesem Fall offenbar die Laserfrequenz nicht fixiert war, so dass die Messungen insgesamt als Ausreißer gewertet wurden. Wegen weiterer laut Zeitplan anstehender Kugelmessungen konnten die betroffenen Messungen nicht wiederholt werden.

In Abbildung 4.11 fällt zunächst auf, dass die Ergebnisse beider Messpositionen eine ähnliche Struktur aufweisen. Am linken Rand des Sichtfelds wird der Durchmesser an der Messposition größer gemessen als am rechten Rand. Die Ergebniswerte umfassen in beiden Fällen einen Bereich von $1,6\text{nm}$, so dass auf Grund der Messunsicherheit von rund 1nm allerdings keine eindeutige Abhängigkeit von der Position im Sichtfeld abgeleitet werden kann. Insbesondere spricht dagegen, dass die Struktur im Sichtfeld erheblich



(a) Ergebnisse für die Messposition nach Abbildung 4.8(a)



(b) Ergebnisse für die Messposition nach Abbildung 4.8(b)

Abbildung 4.11: Positionen der ausgewählten Messposition im Sichtfeld chronologisch durchnummeriert. Die Farbskala gibt die zugehörigen Messwerte an (hier: jeweils der halbe Durchmesser) und umfasst jeweils rund 1,6 nm.

anders aussieht, wenn eine dritte Messposition – nämlich der Scheitelpunkt der Winkelmarkierung selbst – betrachtet wird (vgl. Abbildung 4.12). Die Werte schwanken auch in diesem Fall um 1,6 nm.

Obwohl die Objektive speziell für Hochpräzisionszwecke gefertigt sind, bleiben Abweichungen von der sphärischen Form der Referenzflächen übrig, die durch pixelweise Mittelwertbildung über viele Einzelmessungen ermittelt werden können. Dabei ist lediglich vorauszusetzen, dass die Messungen an verschiedenen Stellen der Kugel durchgeführt werden, damit sich die Kugeltopografie herausmittelt. Bei den Messdatensätzen von Kugeltopografien mit einigen zehn Nanometern Höhenumfang und 20 bis 40 Einzelmessungen ist das hinreichend der Fall [78]. Die sich daraus ergebende Formabweichung der Objektive variiert um 63 nm bzw. 33 nm (vgl. Abbildung 4.13). Dass sich diese Abwei-

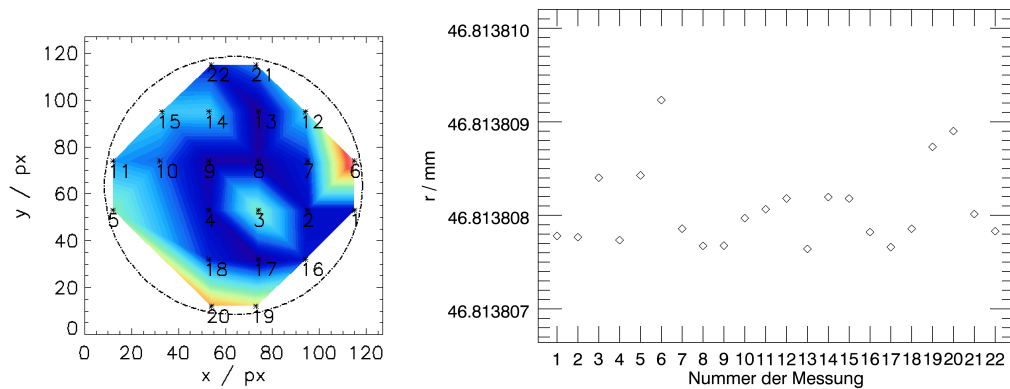
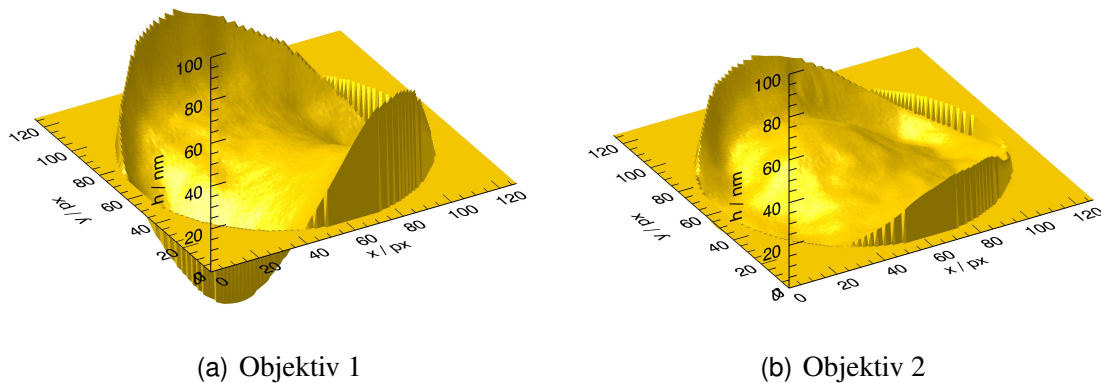


Abbildung 4.12: Positionen der Winkelmarkierung als ausgewählte Messposition im Sichtfeld chronologisch durchnummeriert. Die Farbskala gibt die zugehörigen Messwerte an (hier: jeweils der halbe Durchmesser) und umfasst rund 1,6 nm.



(a) Objektiv 1

(b) Objektiv 2

Abbildung 4.13: Formabweichungen der Objektivreferenzflächen, die sich durch Mittelung von rund 20 Einzelmessungen ergeben, so dass die Kugeltopografie ausgemittelt wird. Die Dynamik umfasst für Objektiv 1 einen Bereich von 63 nm (-26,6 nm und +36,4 nm von der Nullebene aus) und 33 nm (-12,3 nm und +20,9 nm) für Objektiv 2. Positive Werte bedeuten, dass die Formabweichung einen größeren Radius als die angepasste Idealsphäre hat, negative Werte zeigen einen kleineren Radius an.

chungen nicht eindeutig in den Messergebnissen wiederfinden lassen, zeigt, dass die topografischen Eigenschaften der Objektive und Referenzflächen durch die Differenzbildung in der Durchmesserauswertung eliminiert werden. Die Messungen an den hier beschriebenen rund 20 Positionen im Sichtfeld der Objektive lassen jedenfalls mit der in diesem Fall gegebenen Auflösung und Messunsicherheit keine eindeutige Abhängigkeit von der Position im Sichtfeld erkennen.

5 Bestimmung von Radiustopografien

5.1 Einführung

Da das Kugelinterferometer vom Prinzip her nur die absolute Durchmesserbestimmung erlaubt, erhält man als Resultat eine Durchmessertopografie. Das bedeutet, dass die gemessenen Durchmesser punktsymmetrisch zum mathematischen Mittelpunkt der Kugel angeordnet sind, weil die Information über die eigentliche radiale Position in die eine oder andere Richtung fehlt. Um die wahre Form der Kugel als im Allgemeinen nicht punktsymmetrische Radiustopografie zu ermitteln, ist es wünschenswert, die Messdatensätze in einer Weise auszuwerten, die die topografische Information von gegenüber liegenden Seiten der Kugel separat berücksichtigt.

Zwar gibt es interferometrische Methoden, um Sphärizitätsabweichungen absolut zu messen [79] oder Kugelradien direkt zu ermitteln, indem der Verschiebeweg zwischen konfokaler und „Cat’s-Eye“-Position gemessen wird („Radius-of-Curvature“-Messung) [80], dafür ist aber jeweils ein entsprechend konzipierter Versuchsaufbau notwendig. Für das Kugelinterferometer bietet sich eine andere Möglichkeit. Sogenannte Stitching-Verfahren, mit denen Topografiesegmente zusammengesetzt werden können, sind bereits länger im Bereich der Optikherstellung und Wellenfrontuntersuchung bekannt. Der Anwendungszweck besteht vorwiegend darin, die Form stark asphärischer oder sehr großer optischer Flächen interferometrisch zu vermessen, wobei die Messoptik klein und damit kostengünstig gehalten werden kann [81, 82]. Die Ansätze unterscheiden sich unter anderem darin, ob der Stitching-Prozess die Gesamtopografie Segment für Segment zusammensetzt [83] oder die Anpassungsparameter für alle Segmente gleichzeitig ermittelt werden [84]. Im Fall des Kugelinterferometers ermöglicht es der Stitching-Ansatz, aus den gemessenen Segmenten die Radiustopografie oder – sollte der Absolutdurchmesser unbekannt ist sein – zumindest die Formabweichung von einer Idealsphäre zu erhalten.

Griesmann et al. [85, 86] haben ein solches Verfahren mit den Ergebnissen von „Radius-of-Curvature“-Messungen kombiniert, um die wirkliche Form der gemessenen Kugel an auf der Oberfläche verteilten Rekonstruktionspunkten zu ermitteln. Die verbliebenen Discrepanzen der lokalen Radien waren dabei allerdings größer als die zu Grunde liegenden Formabweichungen der Kugeloberfläche, was vor allen Dingen auf die große Messun-

sicherheit der Radiusbestimmung von 96 nm zurückgeführt wird [87]. Der verwendete Aufbau ähnelt einem einzelnen Arm des Kugelinterferometers der PTB und erlaubt daher nur einseitige Messungen. Die in jeder Einzelmessung enthaltene konstante Formabweichung der Objektiv-Referenzfläche wurde über eine Kalibrierung wie in Abschnitt 4.3.2 (z. B. die Topografien auf Seite 52) ermittelt und subtrahiert.

Eine Erweiterung und Modifizierung dieser Herangehensweise wird in den folgenden Abschnitten des vorliegenden Kapitels vorgestellt. Der speziell für das Kugelinterferometer der PTB entwickelte Stitching-Algorithmus berücksichtigt das zweiseitige Messprinzip und modelliert neben der Kugeltopografie und den Offset- und Kippungsanteilen jeder Einzelmessung zusätzlich auch die Formabweichungen der Objektiv-Referenzflächen. An Stelle einer separaten Kalibrierung ist die Ermittlung der Formabweichungen der Referenzflächen also in den Algorithmus integriert. Die erwähnten Offset- und Kippungsanteile resultieren daher, dass von Einzelmessung zu Einzelmessung Objektiv und Kugel eine unterschiedliche Lage zueinander haben können, wenn die Kugel z. B. auf Grund ihrer nicht ideal sphärischen Form anders als vorher in der Messposition abgelegt wird. Die Berücksichtigung von Offset- und Kippungsanteilen und Formabweichungen der Objektiv-Referenzflächen ist erforderlich, weil sie nicht wie bei der Durchmessererauswertung durch die zusätzliche Messung ohne Kugel eliminiert werden. Weiterhin wird ein in [88] beschriebener Ansatz herangezogen, um die Rekonstruktion der Kugelform auf der Basis von Kugelflächenfunktionen umzusetzen. Das dort vorgestellte Verfahren entspricht einem rudimentären Stitching-Ansatz, wobei allerdings die Referenzflächenformabweichung keine Berücksichtigung findet. Die Verwendung der Kugelflächenfunktionen bringt den Vorteil mit sich, die von Griesmann *et. al.* an den Rekonstruktionspunkten verwendete „Nearest-neighbor interpolation“ und daraus resultierende Interpolationsfehler zu vermeiden. Die Berücksichtigung des zweiseitigen Messprinzips ermöglicht es schließlich, die absoluten Durchmesserergebnisse ohne Zusatzmessungen für eine absolute Referenzierung der Radiustopografie heranzuziehen.

Die folgenden Abschnitte umfassen eine Beschreibung der implementierten Modellvarianten, die Ergebnisse von Validierungsdurchläufen mit simulierten Daten und schließlich die Ermittlung der Radiustopografien von wirklich gemessenen Kugeln, die zusätzlich mit am CSIRO durchgeführten Rundheitsmessungen verglichen werden.

5.2 Modell und mathematische Grundlage

Die Grundvoraussetzung ist eine Menge an Messungen, welche mit überlappenden Bereichen zu benachbarten Messungen die Topografie der Kugel abdecken. Passend zusam-

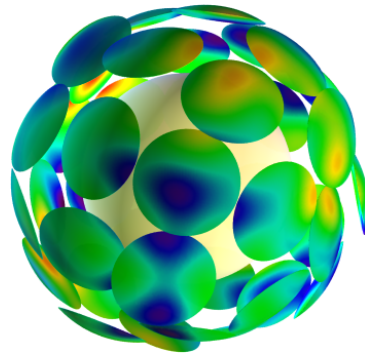


Abbildung 5.1: Illustration zur Idee des Stitching-Verfahrens

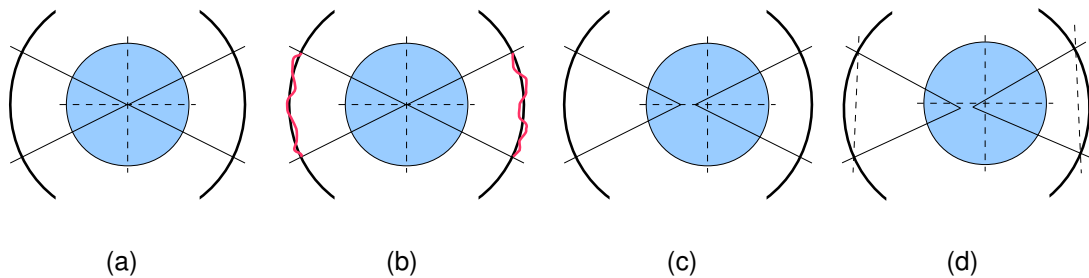


Abbildung 5.2: Im Stitching-Modell enthaltene Effekte: (a) Konzentrischer Idealfall, (b) Formabweichung der Objektiv-Referenzflächen, (c) Verschiebung/„Kippung“ der Kugel und (d) Verschiebung/Kippung der Objektive

mengesetzt ergeben die Segmente die Gesamtopografie der Kugel (vgl. Abbildung 5.1). Bei ideal sphärischen Objektiv-Referenzflächen, einer idealen sphärischen Kugeltopografie und perfekt konzentrischer Justierung (Abbildung 5.2(a)), müsste lediglich die Orientierung der Messposition bekannt sein, um die Segmente korrekt zusammenzusetzen. In der Praxis kommt jedoch hinzu, dass nicht nur die Kugel, sondern auch die Referenzflächen eine Formabweichung aufweisen (Abbildung 5.2(b)). Weiterhin zeigt sich ein Effekt durch die Umpositionierung der Kugel zwischen den Einzelmessungen. Jedes erneute Ablegen der Kugel auf der Dreipunktauflage kann dafür sorgen, dass sich der Kugelmittelpunkt relativ zu den Krümmungsmittelpunkten der Referenzflächen verschiebt (Abbildung 5.2(c)). Den gleichen Effekt verursacht eine thermische Streckung oder Stauchung des Etalons oder eine Nachjustierung der Objektive, wobei in diesem Fall neben einem Offset auch eine Kippung hinzukommen kann (Abbildung 5.2(d)). Eine Unterscheidung zwischen einer Verschiebung der Kugel und einer gleichsinnigen Verschiebung der Objektive ist nicht möglich. Die Verschiebungen können in einen Anteil parallel zur optischen Achse und einen Anteil senkrecht dazu zerlegt werden. Den Erfahrungen von den Durchmesser-messungen nach spielen sie sich im Bereich der Größenordnung der Wellenlänge – also bis zu einigen 100 nm – ab. Da die axiale Auflösung im Nanometerbereich liegt, während die laterale Auflösung nur knapp die Millimetergrenze unterschreitet, müssen im

Modell entsprechende Korrekturen zumindest in axialer Richtung berücksichtigt werden. Streng genommen müsste eine Kompensation für etwaige Positionierfehler bei der Kugelrotation auch ins Modell integriert werden. Diese bleibt hier aber unberücksichtigt, weil die Positioniergenauigkeit der Rotation deutlich besser als die laterale Kameraauflösung ist und gleichzeitig die in der Topografie enthaltenen Steigungen gering sind.

Zusammengefasst beschreibt das Modell also die Radien der Kugeltopografie, die Formabweichung der Objektiv-Referenzflächen und die Offset- und Kippungskorrekturen jeder Einzelmessung. Durch die Stitching-Prozedur können die Referenzflächenformen und die Offset- und Kippungskorrekturen aber nur dann ermittelt werden, wenn sich die Einzelmessungen überlappen und sie an verschiedenen Stellen der Kugel durchgeführt werden. Im Idealfall kommt es zu 100 % Überlappung bei zwei Messungen an der selben Stelle der Kugel. Eine Änderung der dabei resultierenden Messwerte wäre dann in den Korrekturen zu berücksichtigen. Unter diesen Umständen sind alle nötigen Informationen vorhanden, um die im Modell enthaltenen Anteile zu separieren und das zu Grunde liegende Gleichungssystem linear unabhängig sein zu lassen.

Ein Vorteil des Stitchings einer geschlossenen Kugelfläche gegenüber ebenen Flächen besteht darin, dass es keinen Rand gibt, der einer gesonderten Behandlung bedarf. Es bietet sich außerdem an, als Koordinatenreferenzpunkt den Mittelpunkt der zu rekonstruierenden Kugel auszuwählen, was im Gleichungssystem entsprechend berücksichtigt werden muss. Die mathematische Darstellung des Modells und das Lösungsverfahren des zugehörigen Stitching-Algorithmus werden in den folgenden Abschnitten erläutert.

5.2.1 Parametrisierung mit Kugelflächenfunktionen

Die Grundlage des Algorithmus bildet ein Gleichungssystem, das die von den Objekten 1 und 2 an gegenüber liegenden Seiten der Kugel gemessene topografische Information nicht wie bei der Auswertung nach Abschnitt 3.2 vermischt, sondern separat behandelt. Enthalten sein sollen die Radien der Kugeltopografie, die Formabweichung der Objektiv-Referenzflächen und die Offset- und Kippungskorrekturen jeder Einzelmessung. Für die Kugeltopografie bietet sich eine Parametrisierung analog zu Gleichung (3.31) aus Abschnitt 3.5.1 an. Der Unterschied besteht darin, dass hier auch die ungeraden ℓ einbezogen werden müssen. Außerdem steht zunächst keine Information über den absoluten mittleren Radius zur Verfügung und die Rekonstruktion soll so stattfinden, dass der Koordinatenursprung mit dem Kugelmittelpunkt übereinstimmt. Dazu werden $\ell = 0$ und $\ell = 1$ ausgelassen. Die Parametrisierung der Radiustopografie, die vorerst nur die Abweichun-

gen von einem mittleren Radius beschreibt, lautet also:

$$\mathcal{R}_r(\vartheta, \varphi) = \sum_{\ell=2}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} k_{\ell m} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) . \quad (5.1)$$

Darin sind $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$ wieder reelle Kugelflächenfunktionen nach Gleichung (3.29), die die Kugeltopografie mit einem in der Praxis beschränkten Satz von N_{SH} Koeffizienten $k_{\ell m}$ darstellen. Der absolute Radius kann nachträglich in einem zweiten Schritt ergänzt werden, indem der bei der Durchmesserauswertung erhaltene mittlere Radius als mittlerer Radius der Kugelformabweichung verwendet wird.

Der zweite zu modellierende Teil sind die Referenzflächen der Objektive $^1\mathcal{O}$ und $^2\mathcal{O}$. Statt die einzelnen Pixel für die Darstellung zu verwenden, soll auch hier auf eine Parametrisierung zurückgegriffen werden. Der Ausdruck

$$^j\mathcal{O}(n_{\text{px}}) = \sum_{i=4}^{N_Z} {}^j o_i Z_i(n_{\text{px}}) \quad (5.2)$$

ist die Entwicklung der Referenzfläche j (mit $j \in \{1, 2\}$) nach den Zernike-Polynomen¹ $Z_i(n_{\text{px}})$ bis zur Ordnung N_Z durch die Koeffizienten ${}^j o_i$. n_{px} bezeichnet die Pixelposition im Bildfeld. Die Indexreihenfolge der Polynome ist wie in [90] gewählt. Dass die Summe bei $i = 4$ beginnt, hängt damit zusammen, dass die Abweichungen Offset, Kippung (in zwei Richtungen) und Defokus nicht eindeutig der Formabweichung zugeordnet werden können und daher als die noch zu beschreibenden Korrekturen im Modell untergebracht sind.

Dieser dritte Teil des Modells umfasst also die Korrekturen von Offset, Kippung und Defokus für jede Einzelmessung. Defokus deshalb, weil ein reiner Offset mit der sphärischen Geometrie bei vorgegebenen festen Krümmungsradien nicht möglich ist. Verschiebt sich eine sphärische Fläche axial zu einer anderen zuvor konzentrisch angeordneten sphärischen Fläche, so kommt zum reinen Offset auf der Verschiebungsachse jenseits davon noch ein parabolischer Anteil hinzu. Die detaillierte Erläuterung ist im Anhang in Abschnitt A.4 auf Seite 127 zu finden. Der Ausdruck für die Korrekturen lautet dann:

$$^B\mathcal{K}(n_{\text{px}}) = \sum_{i=0}^3 K_{z_{B,i}} Z_i(n_{\text{px}}) \quad (5.3)$$

$$^{\bar{B}}\mathcal{K}(n_{\text{px}}) = \sum_{i=0}^3 K_{z_{\bar{B},i}} Z_i(n_{\text{px}}) . \quad (5.4)$$

¹Die Zernike-Polynome [89, 29] bilden eine Orthogonalbasis auf dem Einheitskreis und werden zum Beispiel verwendet, um Wellenfronten oder Abbildungsfehler von optischen Systemen darzustellen.

B ist darin die fortlaufende Nummer einer Einzelmessung, wobei \bar{B} die gleichzeitig mit dem gegenüberliegenden Objektiv durchgeführte Messung bezeichnet. Und die Parametersätze $K_{Z_{B,i}}$ und $K_{Z_{\bar{B},i}}$ geben die auftretenden Anteile an Offset, Kippung und Defokus in jeder Einzelmessung an.

Wenn nun in der B -ten Messung an Pixelposition n_{px} , die den Kugelkoordinaten (ϑ, φ) zugeordnet wird, ein Messwert $m_1(\vartheta, \varphi, n_{\text{px}}, B)$ erzeugt wird, dann wird das Stitching-Modell durch das folgende Gleichungssystem mathematisch repräsentiert:

$$m_1(\vartheta, \varphi, n_{\text{px}}, B) = {}^B\mathcal{K}(n_{\text{px}}) + {}^1\mathcal{O}(n_{\text{px}}) - \mathcal{R}_r(\vartheta, \varphi) \quad (5.5)$$

$$m_2(\bar{\vartheta}, \bar{\varphi}, n_{\text{px}}, \bar{B}) = {}^{\bar{B}}\mathcal{K}(n_{\text{px}}) + {}^2\mathcal{O}(n_{\text{px}}) - \mathcal{R}_r(\bar{\vartheta}, \bar{\varphi}) . \quad (5.6)$$

$m_2(\bar{\vartheta}, \bar{\varphi}, n_{\text{px}}, \bar{B})$ ist der entsprechende Messwert an der diametral gegenüberliegenden Position $\bar{\vartheta} = \pi - \vartheta$ und $\bar{\varphi} = (\pi + \varphi) \bmod 2\pi$. Ein kompakter Ausdruck für das komplette Gleichungssystem lautet in Matrixschreibweise

$$\mathbf{m} = \mathbf{M} \mathbf{x} , \quad (5.7)$$

wobei \mathbf{m} ein Vektor der Länge $2N_B \cdot N_{\text{px}}$ und \mathbf{x} der gesuchte Lösungsvektor ist, der aus den Parametersätzen $K_{Z_{B,i}}$, $K_{Z_{\bar{B},i}}$, j_{O1} , j_{O2} und $k_{\ell m}$ besteht. Die $(2N_B \cdot N_{\text{px}}) \times N_{\text{Parameter}}$ Modellmatrix \mathbf{M} lässt sich in Blockschreibweise ausdrücken als

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{Z}_K & \mathbf{Z}_O & \mathbf{Y} \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

mit

$$\mathbf{Z}_K = \begin{pmatrix} Z_0(0) & \dots & Z_3(0) & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ Z_0(1) & \dots & Z_3(1) & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ Z_0(N_{\text{px}}) & \dots & Z_3(N_{\text{px}}) & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & Z_0(0) & \dots & Z_3(0) & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & Z_0(1) & \dots & Z_3(1) & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & Z_0(N_{\text{px}}) & \dots & Z_3(N_{\text{px}}) & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & Z_0(0) & \dots & Z_3(0) \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & Z_0(1) & \dots & Z_3(1) \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & Z_0(N_{\text{px}}) & \dots & Z_3(N_{\text{px}}) \end{pmatrix} , \quad (5.9)$$

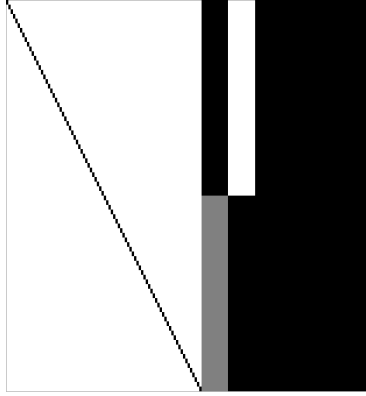


Abbildung 5.3: Beispiel für die Besetzungsstruktur der Modellmatrix mit einem verzerrten Zeilen-zu-Spalten-Verhältnis von etwa 500:1. Der linke diagonal mit kleinen Blöcken besetzte Teil stellt \mathbf{Z}_K dar. Daran schließt sich \mathbf{Z}_O an, wobei der graue Bereich unbesetzte Matrixelemente bezeichnet, die während des Lösungsvorgangs aber gefüllt werden. Der Rest der Matrix ist durch \mathbf{Y} gegeben.

$$\mathbf{Z}_O = \begin{pmatrix} Z_4(0) & Z_5(0) & \dots & Z_{N_Z}(0) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ Z_4(1) & Z_5(1) & \dots & Z_{N_Z}(1) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ Z_4(N_{\text{px}}) & Z_5(N_{\text{px}}) & \dots & Z_{N_Z}(N_{\text{px}}) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ Z_4(0) & Z_5(0) & \dots & Z_{N_Z}(0) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ Z_4(1) & Z_5(1) & \dots & Z_{N_Z}(1) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ Z_4(N_{\text{px}}) & Z_5(N_{\text{px}}) & \dots & Z_{N_Z}(N_{\text{px}}) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ Z_4(0) & Z_5(0) & \dots & Z_{N_Z}(0) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ Z_4(1) & Z_5(1) & \dots & Z_{N_Z}(1) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ Z_4(N_{\text{px}}) & Z_5(N_{\text{px}}) & \dots & Z_{N_Z}(N_{\text{px}}) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & Z_4(0) & Z_5(0) & \dots & Z_{N_Z}(0) \\ 0 & 0 & \dots & 0 & Z_4(1) & Z_5(1) & \dots & Z_{N_Z}(1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & Z_4(N_{\text{px}}) & Z_5(N_{\text{px}}) & \dots & Z_{N_Z}(N_{\text{px}}) \\ 0 & 0 & \dots & 0 & Z_4(0) & Z_5(0) & \dots & Z_{N_Z}(0) \\ 0 & 0 & \dots & 0 & Z_4(1) & Z_5(1) & \dots & Z_{N_Z}(1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & Z_4(N_{\text{px}}) & Z_5(N_{\text{px}}) & \dots & Z_{N_Z}(N_{\text{px}}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & Z_4(0) & Z_5(0) & \dots & Z_{N_Z}(0) \\ 0 & 0 & \dots & 0 & Z_4(1) & Z_5(1) & \dots & Z_{N_Z}(1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & Z_4(N_{\text{px}}) & Z_5(N_{\text{px}}) & \dots & Z_{N_Z}(N_{\text{px}}) \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

und

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} Y_{0,0}(\vartheta_1, \varphi_1) & Y_{1,-1}(\vartheta_1, \varphi_1) & Y_{1,0}(\vartheta_1, \varphi_1) & \dots & Y_{N_{\text{SH}}, N_{\text{SH}}}(\vartheta_1, \varphi_1) \\ Y_{0,0}(\vartheta_2, \varphi_2) & Y_{1,-1}(\vartheta_2, \varphi_2) & Y_{1,0}(\vartheta_2, \varphi_2) & \dots & Y_{N_{\text{SH}}, N_{\text{SH}}}(\vartheta_2, \varphi_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ Y_{0,0}(\vartheta_{2B-N_{\text{px}}}, \varphi_{2B-N_{\text{px}}}) & Y_{1,-1}(\vartheta_{2B-N_{\text{px}}}, \varphi_{2B-N_{\text{px}}}) & Y_{1,0}(\vartheta_{2B-N_{\text{px}}}, \varphi_{2B-N_{\text{px}}}) & \dots & Y_{N_{\text{SH}}, N_{\text{SH}}}(\vartheta_{2B-N_{\text{px}}}, \varphi_{2B-N_{\text{px}}}) \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Mit einer typischen Anzahl von Messungen und darin enthaltenen Pixeln besteht das resultierende überbestimmte lineare Gleichungssystem aus etwa 10^5 bis 10^6 Zeilen und 10^3 bis 10^4 Spalten. Abbildung 5.3 zeigt exemplarisch die Besetzungsstruktur der Modellmatrix mit einem verzerrten Zeilen-zu-Spalten-Verhältnis von etwa 500:1.

5.2.2 Alternative mit Rekonstruktionspunkten

Analog zu Abschnitt 3.5 besteht auch beim Stitching das Problem, dass wegen des begrenzten Arbeitsspeichers und der dadurch bedingten Beschränkung auf eine gewisse Anzahl von Kugelflächenfunktionen einige Merkmale der Kugelform nicht wiedergegeben werden können. Ein Ausweg besteht in der Möglichkeit, die Kugel nur an bestimmten Stellen, die über die Oberfläche verteilt sind, zu rekonstruieren. An die Stelle der in der Modellmatrix (5.8) enthaltenen voll besetzten Blockmatrix \mathbf{Y} rückt zur Beschreibung der Kugeltopografie eine sehr dünn besetzte Matrix, die lediglich Interpolationskoeffizienten enthält, welche die Zuordnung eines Messwerts an der Stelle n_{px} in Messung B zu jedem Rekonstruktionspunkt $(\vartheta, \varphi)_i$ mit $i = 1, \dots, N_r$ beschreiben. Dabei ist zu bedenken, dass je nach gewählter Interpolationsmethode abweichende Ergebnisse auftreten können. Im einfachsten Fall wählt man wie in [85] gemäß der „Nearest-neighbor interpolation“ zum m -ten Messwert denjenigen Rekonstruktionspunkt aus, zu dem die geringste Entfernung besteht. Wenn dies der k -te Punkt ist, dann lautet der zugehörige Koeffizient $C_{(B, n_{\text{px}})_m \rightarrow (\vartheta, \varphi)_k} = 1$. Alle anderen Koeffizienten sind auf Null gesetzt. Besser geeignet für die zweidimensional verteilten Werte auf der Kugeloberfläche sind Ansätze wie „Inverse distance weighting“ [91], wobei die Entfernungen zu mehreren Rekonstruktionspunkten in der Umgebung eines Messwerts als Zuordnungsgewichtung verwendet werden. Im Folgenden werden auf Grund der Gitterstruktur, die in Abschnitt 3.5.2 eingeführt wurde, zu jedem Messwert die sieben nächstliegenden Gitterpunkte k_j mit $j = 1, \dots, 7$ als Rekonstruktionsstellen ausgewählt. Für den m -ten Messwert sind die sieben Interpolationskoeffizienten dann durch

$$C_{(B, n_{\text{px}})_m \rightarrow (\vartheta, \varphi)_{k_j}} = \frac{\frac{1}{\delta(m, k_j)^2}}{\sum_{n=1}^7 \frac{1}{\delta(m, k_n)^2}} \quad (5.12)$$

mit den Abständen $\delta(m, k_j)$ zwischen der Messposition $(\vartheta, \varphi)_m$ und den Gitterpositionen $(\vartheta, \varphi)_{k_j}$ gegeben.

Unabhängig davon, welche Variante der Interpolation zur Anwendung kommt, wird der Kugeltopografieanteil im Modell dann mathematisch durch den Ausdruck

$$\mathcal{R}_r(\vartheta, \varphi)_m = \sum_{i=1}^{N_r} r(\vartheta, \varphi)_i C_{(B, n_{\text{px}})_m \rightarrow (\vartheta, \varphi)_i} \quad (5.13)$$

angegeben, wobei $r(\vartheta, \varphi)_i$ der zu bestimmende Radius an der Rekonstruktionspunktstelle $(\vartheta, \varphi)_i$ ist. Die Blockmatrix \mathbf{Y} in Gleichung (5.8) ist somit durch die folgende Matrix zu

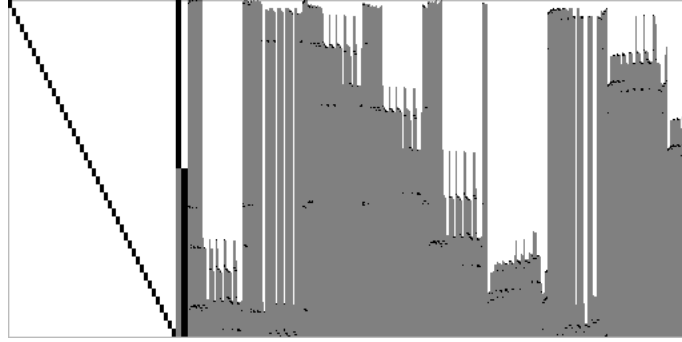


Abbildung 5.4: Beispiel für die Besetzungsstruktur der Modellmatrix mit einem verzerrten Zeilen-zu-Spalten-Verhältnis von etwa 200:1. Der linke diagonal mit kleinen Blöcken besetzte Teil stellt \mathbf{Z}_K dar. Daran schließt sich \mathbf{Z}_O an. Der mit sehr vielen Spalten dominierende Teil mit großen grauen Bereichen repräsentiert \mathbf{C} . Die grauen Flächen bezeichnen unbesetzte Matrixelemente, die während des Lösungsvorgangs aber gefüllt werden.

ersetzen:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} C_{(1,1) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_1} & C_{(1,1) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_2} & C_{(1,1) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_3} & \cdots & C_{(1,1) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_{N_r}} \\ C_{(1,2) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_1} & C_{(1,2) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_2} & C_{(1,2) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_3} & \cdots & C_{(1,2) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_{N_r}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{1, (2N_B, N_{px}) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_1} & C_{2, (2N_B, N_{px}) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_2} & C_{0, (2N_B, N_{px}) \rightarrow (\vartheta, \varphi)_3} & \cdots & C_{2N_B, N_{px}} \rightarrow (\vartheta, \varphi)_{N_r} \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

In dieser Form hat das Modell aber noch keinen festen Bezugspunkt im Raum, wie er im Fall der Kugelflächenfunktionen in Gleichung (5.1) durch das Weglassen der ersten Ordnungen definiert wurde. In der Folge könnte die Lösung beliebig große Werte für die Radiusparameter und die Offset-Anteile der Korrekturparameter annehmen. Eine Fixierung im Raum lässt sich im Fall der Rekonstruktionpunkte dadurch erreichen, dass dem Gleichungssystem eine Zeile hinzugefügt wird, die ausdrückt, dass der Mittelwert aller Radien Null sein soll. Die hinzuzufügende Zeile enthält also in den Spalten der Radiusparameter jeweils die reziproke Rekonstruktionpunktzahl und in allen übrigen Spalten eine Null. Die Struktur von \mathbf{M} sieht schließlich aus wie in Abbildung 5.4 exemplarisch dargestellt. Das Zeilen-zu-Spalten-Verhältnis beträgt in diesem Beispiel etwa 200:1.

Zwar ist bei dieser Methode eine größere Anzahl von zu bestimmenden Parametern nötig, wenn man zur vorherigen Methode vergleichbar gute Rekonstruktionen erhalten möchte, aber der Speicherbedarf reduziert sich, weil die Matrix (besonders im Block \mathbf{C}) nur extrem dünn besetzt ist und deshalb effizient im Sparse-Format² gespeichert werden kann. Zwar wird dieser Vorteil wieder etwas relativiert, weil während des Lösungsvorgangs zahlreiche Matrixelemente, die vorher unbesetzt waren, gefüllt werden, aber im Vergleich zur

²Beim Sparse-Format werden nur die Matrixelemente gespeichert, die ungleich Null sind. Dafür gibt es verschiedene Ansätze, bei denen entweder die Zeilen- und Spaltenindizes jedes Elements oder einem eindeutigen Schema folgend nur bestimmte Indizes gespeichert werden [92].

Blockmatrix \mathbf{Y} ist der Speicherbedarf nur ungefähr halb so groß. Aus diesem Grund kann die Anzahl der Parameter – also die Spaltenanzahl der Modellmatrix – erhöht werden.

5.2.3 „Least squares“-Lösung und Unsicherheitsbetrachtung

Zur Lösung des überbestimmten Gleichungssystems $\mathbf{M} \mathbf{x} = \mathbf{m}$ wird eine Ausgleichsrechnung über die Minimierung der Summe der Residuenquadrate durchgeführt [59]. Minimiert wird dabei der Ausdruck

$$\chi^2 = |\mathbf{M} \mathbf{x} - \mathbf{m}|^2 = (\mathbf{M} \mathbf{x} - \mathbf{m})^T (\mathbf{M} \mathbf{x} - \mathbf{m}) . \quad (5.15)$$

Wenn die Spalten von \mathbf{M} linear unabhängig sind, hat das Minimierungsproblem eine eindeutige Lösung, die über das Auflösen der Normalgleichung

$$\mathbf{M}^T \mathbf{M} \mathbf{x} = \mathbf{M}^T \mathbf{m} \quad (5.16)$$

gefunden werden kann. Zu diesem Zweck muss die sogenannte Pseudoinverse $(\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} \mathbf{M}^T$ berechnet werden, was bei schlecht konditionierten Systemen zu numerischen Fehlern führen kann. Numerisch stabiler sind Verfahren wie die QR-Zerlegung, weil dabei die Berechnung des unter Umständen quadratisch schlecht konditionierten Matrixprodukts $\mathbf{M}^T \mathbf{M}$ vermieden werden kann.

Aus diesem Grund erfolgt im Rahmen der vorliegenden Arbeit die Lösung des Gleichungssystems über eine QR-Zerlegung unter Anwendung von Givens-Transformationen [93]. Durch einen speziell entwickelten Lösungsalgorithmus [94] wird neben der numerischen Stabilität außerdem die Möglichkeit gegeben, den niedrigen Besetzungsgrad der Matrix auszunutzen und sie im Sparse-Format zu verarbeiten. Dabei wird die Modellmatrix \mathbf{M} in das Produkt aus einer $N_{\text{row}} \times N_{\text{col}}$ oberen Dreiecksmatrix \mathbf{R} und einer $N_{\text{row}} \times N_{\text{row}}$ Orthogonalmatrix³ \mathbf{Q} zerlegt:

$$\mathbf{M} = \mathbf{Q} \mathbf{R} . \quad (5.17)$$

\mathbf{R} lässt sich in Blockschreibweise auch wie folgt ausdrücken:

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}' \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} . \quad (5.18)$$

Darin besteht \mathbf{R}' nur aus den ersten N_{col} Zeilen von \mathbf{R} , während $\mathbf{0}$ eine $(N_{\text{row}} - N_{\text{col}}) \times N_{\text{col}}$ Matrix ist, die nur Nullen enthält.

³Eine Orthogonalmatrix hat die Eigenschaft, dass das Produkt mit der Transponierten die Einheitsmatrix ergibt: $\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}$.

Konkret ausgedrückt sorgen entsprechend durchgeführte Givens-Transformationen dafür, dass die Elemente unterhalb der Diagonalen von \mathbf{M} zu Null werden, wodurch aus \mathbf{M} die obere Dreiecksmatrix \mathbf{R} hervorgeht. Zusätzlich ergibt sich aus der Hintereinanderreihung der Givens-Matrizen die Transponierte von \mathbf{Q} :

$$\mathbf{Q}^T = \mathbf{G}_n \dots \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 . \quad (5.19)$$

Die Transformation wird also durch $\mathbf{R} = \mathbf{Q}^T \mathbf{M}$ ausgedrückt, was umgeformt die QR-Zerlegung $\mathbf{M} = \mathbf{Q} \mathbf{R}$ darstellt. Das Gleichungssystem wird damit zu

$$\mathbf{R} \mathbf{x} = \mathbf{Q}^T \mathbf{m} \quad (5.20)$$

und lässt sich unten anfangen durch Rückwärtseinsetzen zeilenweise lösen.

Aus den Residuen der Anpassung erhält man das minimierte χ_{\min}^2 . Daraus ergibt sich die mittlere Unsicherheit σ_m der Eingabedaten \mathbf{m} zu

$$\sigma_m = \sqrt{\frac{\chi_{\min}^2}{N_{\text{row}} - N_{\text{col}}}} . \quad (5.21)$$

Die Kovarianz- oder Unsicherheitsmatrix für die Lösung \mathbf{x} des ursprünglichen Gleichungssystem erhält man nach [94] über

$$\mathbf{U} = \sigma_m^2 \cdot (\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} . \quad (5.22)$$

Mit Gleichung (5.17) wird daraus

$$\mathbf{U} = \sigma_m^2 \cdot ((\mathbf{Q} \mathbf{R})^T \mathbf{Q} \mathbf{R})^{-1} = \sigma_m^2 \cdot (\mathbf{R}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{Q} \mathbf{R})^{-1} = \sigma_m^2 \cdot (\mathbf{R}^T \mathbf{R})^{-1} \quad (5.23)$$

$$= \sigma_m^2 \cdot \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{R}^{-1})^T , \quad (5.24)$$

was wegen der oberen Dreiecksform von \mathbf{R} einfach auszurechnen ist. Die Standardabweichungen σ_x der einzelnen Lösungsparameter sind dann die Quadratwurzeln der Diagonalelemente von \mathbf{U} .

Zur Bewertung der Qualität der Lösung stehen damit verschiedene Größen zur Verfügung. So können die relativen Unsicherheiten der Modellparameter auf überflüssige Parameter hinweisen, die keinen Beitrag in der Anpassung leisten, so dass $(\sigma_x)_i / (x)_i \gg 1$ ist. Trifft dieser Fall auf zu viele Parameter zu, sollte der Parametersatz entsprechend angepasst werden.

Weiterhin stellt σ_m ein Bewertungsmaß für das Modell dar. Ist σ_m deutlich größer als die für \mathbf{m} angenommenen Unsicherheiten, dann passt entweder das Modell generell nicht zu den Daten oder es liegt eine Unteranpassung vor, die sich mit mehr Parametern beheben lässt. Wenn σ_m erheblich zu klein ist, kann es zur Überanpassung durch einen zu großen

Parametersatz gekommen sein. Der Extremfall dabei wäre, dass trotz streuender Messwerte jeder Wert exakt getroffen wird, was nicht der Realität entspricht.

Zusätzlich besteht die Möglichkeit, die „Root-Mean-Square (RMS)“-Abweichung zwischen der Lösung und einem bekannten Vergleichsdatensatz zu ermitteln, was ebenfalls als Bewertungskriterium für die Güte der Anpassung verstanden werden kann.

Soll nicht ein Ergebnis für sich alleine betrachtet werden, sondern zwei oder mehr Ergebnisse relativ zueinander („Welches ist besser?“), kann als Gütemaß die Wurzel aus der Summe der Diagonalelemente von \mathbf{U}

$$g_{\text{Maß}} = \sqrt{\text{tr } \mathbf{U}} \quad (5.25)$$

verwendet werden [95].

5.3 Validierung mit simulierten Daten

Ob der Stitching-Algorithmus sinnvolle Ergebnisse liefert und auch unter Anwesenheit von Fehlereinflüssen wie Rauschen oder Dejustierung anwendbar ist, kann an Hand von simulierten – also a priori bekannten – Datensätzen überprüft werden. Das Ziel besteht darin, den Idealfall aus Abbildung 5.2(a) mit Einflüssen, die beim Messprozess vorkommen können, zu manipulieren und die „simulierten Messwerte“ dem Stitching-Verfahren zu unterziehen. Da im Simulationsprozess die unverfälschte Originaltopografie und die erzeugten Einflussgrößen bekannt sind, lässt sich das Stitching-Ergebnis mit der bekannten Vorgabe vergleichen. Dem GUM gemäße Unsicherheitsangaben [70, 71, 96] sind einerseits wegen der Komplexität des Modells und andererseits auch über Monte-Carlo-Rechnungen auf Grund der zu großen Laufzeit eines einzelnen Simulations- und Stitching-Vorgangs nicht zu erreichen. Stattdessen wird als Bewertungskriterium die RMS-Abweichung zwischen der störungsfreien simulierten und der rekonstruierten Topografie betrachtet.

In den folgenden Unterabschnitten wird zunächst auf die Erzeugung des simulierten Datensatzes eingegangen, um damit anschließend exemplarisch den Fall einer idealen Rekonstruktion vorzustellen und an diesem Beispiel die Verwendung der Bewertungskriterien vorzuführen. Dabei entspricht die Anzahl der Rekonstruktionsparameter exakt derjenigen, die für die Erzeugung verwendet wurde. Danach folgen weitergehende Untersuchungen von verschiedenen potentiellen Einflussfaktoren auf das Rekonstruktionsergebnis. Da die simulierte Kugeltopografie aus einem Satz von Kugelflächenfunktionen besteht, werden die Rekonstruktionsvorgänge wegen der besseren Vergleichbarkeit zunächst nur mit der auf Kugelflächenfunktionen basierenden Methode aus Abschnitt 5.2.1 durchgeführt.

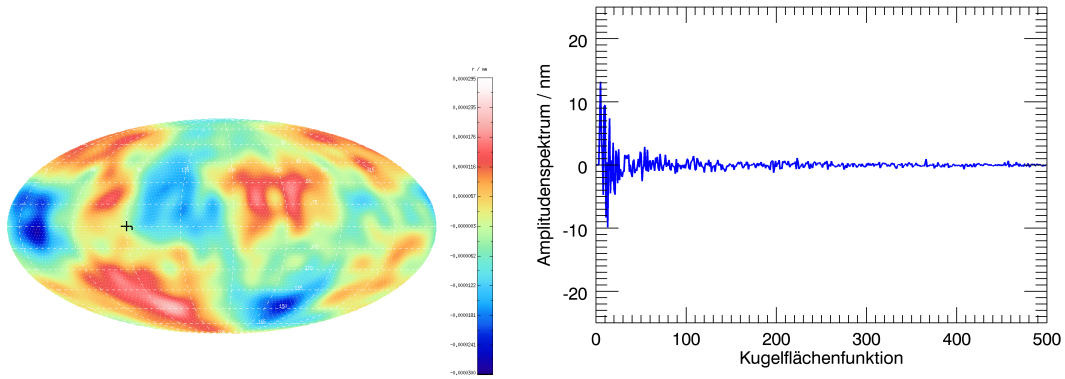


Abbildung 5.5: Simulierte Radiustopografie bestehend aus 500 Kugelflächenfunktionen und das zugehörige Amplitudenspektrum. Die Farbskala umfasst einen Bereich von 50 nm.

5.3.1 Erzeugen der simulierten Messung

Zunächst wurde eine Kugeltopografie ähnlich wie in Gleichung (4.3) auf Seite 47 erzeugt. Der Unterschied besteht darin, dass hier die Einschränkung auf gerade ℓ entfällt, um diametral gegenüberliegend unterschiedliche Radien zu ermöglichen. Die Definition der Topografie lautet damit:

$$\mathcal{R}_d(\vartheta, \varphi) = k_{00} + \eta_a \cdot \sum_{\ell=2}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (\ell^{-\eta_e} \cdot p_{\ell m}) \cdot Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi), \quad (5.26)$$

wobei die Doppelsumme nur so weit ausgeführt wird, dass $N_{\text{SH}} = 500$ Koeffizienten $k_{\ell m}$ einbezogen werden. Der Basisradius ist auf $k_{00} = 46,850 \text{ mm}$ gesetzt und die maximale Amplitude auf $\eta_a = 25 \text{ nm}$. Der Gewichtungsexponent ist $\eta_e = 1,5$. Die daraus resultierende Topografie ist zusammen mit dem Amplitudenspektrum in Abbildung 5.5 dargestellt. Die Farbskala umfasst einen Bereich von 50 nm.

Neben der Kugeltopografie müssen auch die Topografien der Objektiv-Referenzflächen in den simulierten Messdaten enthalten sein. Statt völlig willkürlich generierte Formen zu nehmen, wird auf eine Näherung der tatsächlich vorhandenen Objektive zurückgegriffen. Dafür wurden Originalmessdaten von beiden Objektiven getrennt pixelweise gemittelt, so dass die Kugeltopografie eliminiert wird und lediglich der in jeder Messung gleich gebliebene Anteil der Objektivtopografien übrig ist. Eine Anpassung der ersten 50 Zernike-Polynome an die gemittelten Datensätze stellt dann die „simulierten Objektivtopografien“ dar, wie sie in Abbildung 5.6 aufgeführt sind.

Auf dieser Grundlage können schließlich simulierte Messungen durchgeführt werden. Zuerst muss dazu ein Satz von Messpositionen festgelegt sein, der bestimmt, an welchen Stellen der Kugel jeweils das Segment einer Einzelmessung ermittelt werden kann. Über die Zusammenhänge aus Abschnitt 3.4 lässt sich zu jeder Position der passende

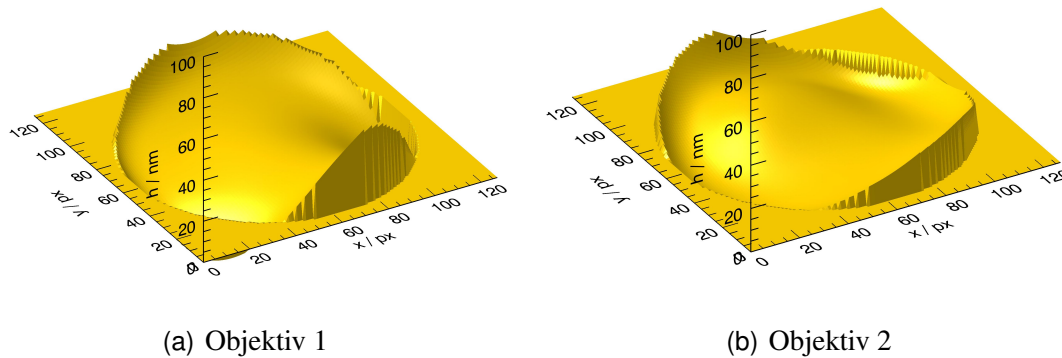


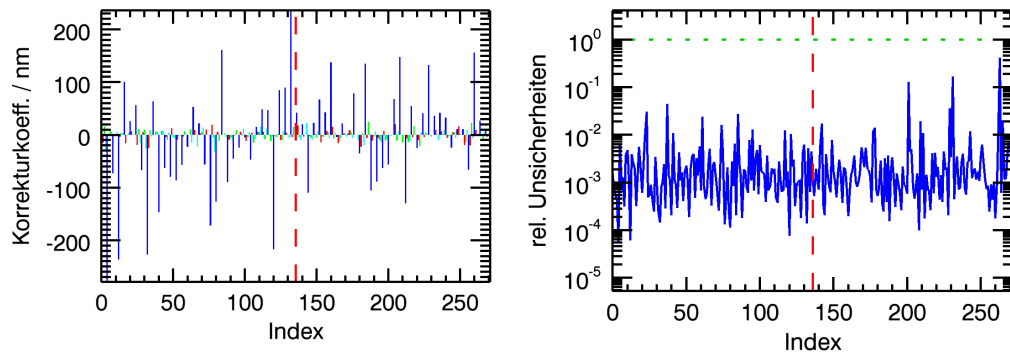
Abbildung 5.6: Simulierte Objektvtopografien aus jeweils 50 Zernike-Polynomen. Die Höhenvariationen umfassen rund (a) 63 nm und (b) 33 nm. Positive Werte bedeuten, dass die Formabweichung einen größeren Radius als die angepasste Idealsphäre hat, negative Werte zeigen einen kleineren Radius an.

Topografieausschnitt aus der Blickrichtung beider Objektive ausrechnen. Mit negativem Vorzeichen wird der Ausschnitt anschließend zur entsprechenden Objektvtopografie addiert. Das negative Vorzeichen sorgt für die korrekte Berücksichtigung der in der Fizeau-Anordnung entgegengesetzt ausgerichteten Oberflächen von Objektiv und Kugel (vgl. Abschnitt 2.1). Dem Einfluss von Offset, Kippungen und Defokus wird durch Addition der mit Zufallszahlen skalierten Zernike-Polynome 1 bis 4 Rechnung getragen. Diese Zufallszahlen sind normalverteilt mit dem Mittelwert 0 nm und den Standardabweichungen 100 nm für den Offset und 10 nm für die anderen drei Anteile. Am Ende wird noch ein Pixelrauschen addiert, das normalverteilt ist um den Mittelwert 0 nm mit der Standardabweichung 0,5 nm.

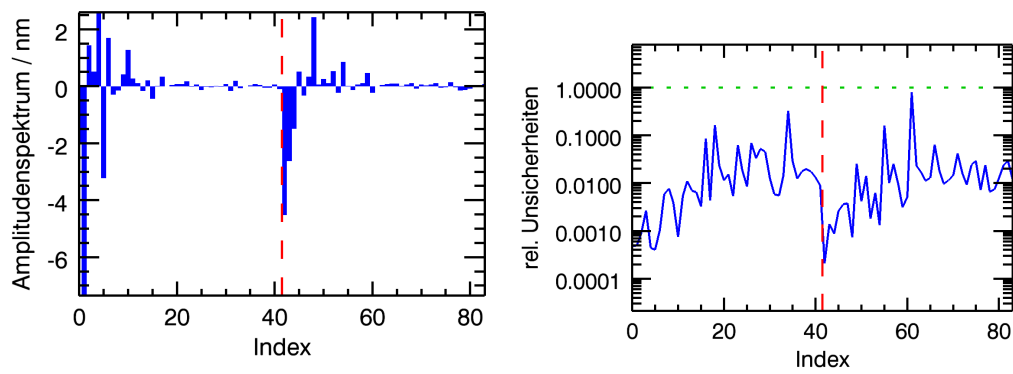
5.3.2 Ideale Rekonstruktion

Wenn das Stitching-Verfahren funktioniert und der Modellansatz korrekt ist, dann muss mindestens ein simulierter Datensatz so verarbeitet werden können, dass das Stitching-Ergebnis den Werten der Simulationsparameter entspricht. Um das zu überprüfen, wurde exakt die selbe Anzahl von Parametern der Zernike-Polynome und Kugelflächenfunktionen für eine Rekonstruktion gewählt, wie sie auch für die Simulation verwendet wurde. Würde die Rekonstruktion mit mehr Parametern ablaufen, so müssten die überschüssigen Werte Null sein. Bei weniger Parametern ist keine perfekte Rekonstruktion möglich, was dem Fall der wirklich gemessenen Kugeln entspricht, wo hochfrequente Anteile zwar gering sind, aber keiner scharfen Grenze unterliegen.

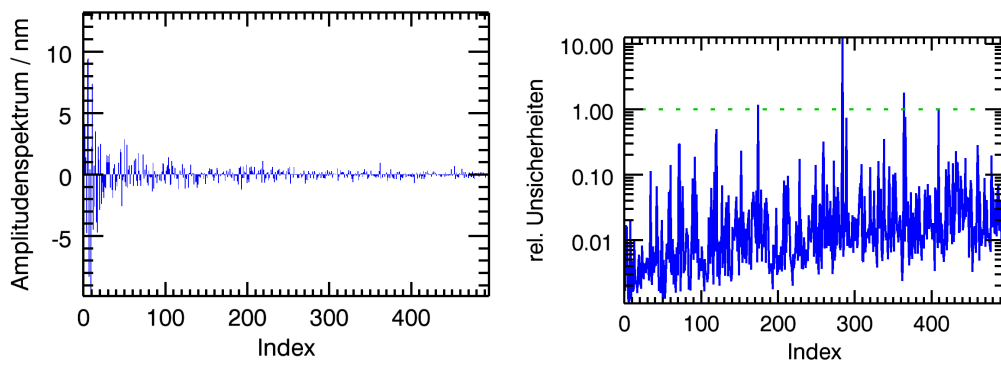
Für die Simulation wurde das später noch vorkommende Abdeckungsschema aus Abbildung 5.8(b) verwendet, das aus 34 beidseitigen Einzelmessungen besteht. Der resultie-



(a) Korrekturkoeffizienten



(b) Objektivtopografien



(c) Kugeltopografie

Abbildung 5.7: Grafische Darstellung des Lösungsvektors für die Idealrekonstruktion der simulierten Topografie. Die rot gestrichelte Linie trennt die Parameter, die den Datensätzen der beiden Interferometerarme zugeordnet werden. Die grün gestrichelte Linie markiert die Ordinate 1, bei deren Überschreiten die Unsicherheit größer als der Wert selbst ist.

rende Lösungsvektor der entsprechenden Rekonstruktion ist in Abbildung 5.7 grafisch dargestellt. 5.7(a) zeigt die Korrekturkoeffizienten für Offset (blau), Kippungen (rot und grün) und Defokus (hellblau). Die senkrechte gestrichelte Linie markiert die Grenze zwischen den Parameterindizes, die den Messungen von Arm 1 und Arm 2 zugeordnet sind und im Lösungsvektor direkt aufeinander folgen. Rechts daneben sind die zu den Koeffizienten gehörenden relativen Unsicherheiten abgebildet. Die horizontale gestrichelte Linie markiert die Ordinate 1, bei deren Überschreiten die Unsicherheit größer als der Wert selbst ist. In 5.7(b) sind die Koeffizienten der rekonstruierten Objekttopografien und in 5.7(c) die der Kugeltopografie jeweils zusammen mit den relativen Unsicherheiten aufgetragen.

Der Erfolg der Rechnung lässt sich dabei an verschiedenen Daten ablesen. So beträgt zum Beispiel das bei der Rekonstruktion erhaltene σ_m rund 0,51 nm, was gerade dem in der Simulation verwendeten Rauschanteil von 0,5 nm entspricht. Die Standardabweichungen der rekonstruierten Offset-, Kippungs- und Defokuskorrekturen sind rund 100 nm, 10 nm, 9 nm und 10 nm und damit nahezu identisch mit denen der Simulation. Und schließlich ist die RMS-Abweichung der simulierten und der rekonstruierten Kugeltopografiekoefizienten mit rund 0,007 nm deutlich kleiner als die simulierte Messunsicherheit. Ein Rekonstruktionsversuch mit einem Datensatz, der nur aus der simulierten Kugeltopografie ohne weitere Einflussgrößen (Objektivtopografien, Kippungen, etc.) besteht, ergibt sogar relative Unsicherheiten, die nur noch in der Größenordnung der numerischen Genauigkeit des Computers liegen. Zusammenfassend lässt sich also folgern, dass der Stitching-Algorithmus korrekte Ergebnisse liefern kann. Es soll daher im Folgenden untersucht werden, in welchem Maß sich unterschiedliche Randbedingungen auf das Ergebnis auswirken.

5.3.3 Einfluss des Überlappbereichs

Zuerst wird die Auswirkung der Größe von überlappenden Bereiche der Einzelmessungen auf das Stitching-Ergebnis betrachtet. Dazu wurden die in Abbildung 5.8 gezeigten Abdeckungsschemata als Datensatzauswahlen simulierter Messstrategien festgelegt. Diese Schemata bestehen aus (a) 32, (b) 34, (c) 42, (d) 50 und (e) 98 beidseitigen Einzelmessungen und sind so ausgelegt, dass die gezeigte Komplettabdeckung der Kugeloberfläche mit jedem Interferometerarm separat erfüllt wird.⁴ Zur Rekonstruktion wurden 25 Zernike-Polynome für die Objektiv-Referenzflächen und 250 Kugelflächenfunktionen für

⁴Prinzipiell ist es zwar möglich, den Stitching-Vorgang auch nur mit den Daten von einem einzelnen Interferometerarm durchzuführen – was den Messungen aus [85] entsprechen würde –, aber aus praktischen Gründen, die in Abschnitt 5.4.1 erläutert werden, wird darauf hier verzichtet.

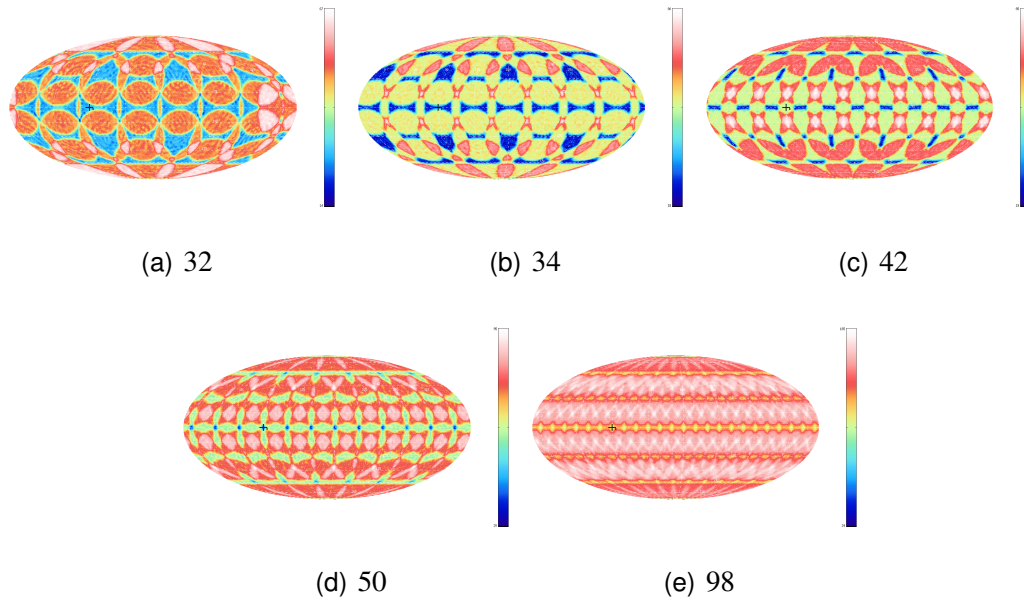


Abbildung 5.8: Für die simulierten Messungen generierte Abdeckungsschemata mit unterschiedlichem Überlapp bestehend aus der jeweils angegebenen Anzahl von beidseitigen Einzelmessungen. Die Farbverteilungen sind nicht zum gegenseitigen Vergleich skaliert, sondern zeigen lediglich an, wo viele (hellrot) und wenige (dunkelblau) Messwerte lokalisiert sind, wobei die Farbskala in jeder Abbildung voll ausgeschöpft ist.

die Kugeltopografie festgelegt, so dass also der Fall einer idealen Rekonstruktion nicht erreicht wird.

Die Bewertungskriterien χ , σ_m , RMS-Abweichung der simulierten und rekonstruierten Kugeltopografie Koeffizienten $\text{RMS}_{\text{coeff}}$ und RMS-Abweichung der simulierten und rekonstruierten Kugeltopografie an 8412 Stellen auf der Kugeloberfläche RMS_{topo} sind in Abbildung 5.9 für die verschiedenen Datensatzauswahlen aufgetragen. Für den Plot wurde χ an Stelle von χ^2 gewählt, um für alle vier Kurven die gleiche Einheit verwenden zu können. Zunächst fällt auf, dass χ mit einer Zunahme der Anzahl der einbezogenen Einzelmessungen ansteigt, während die anderen Größen allenfalls im Zehntelnanometerbereich schwanken oder im Fall von σ_m sogar konstant bleiben. Die RMS-Abweichungen und σ_m deuten also darauf hin, dass die Dichte der Oberflächenabdeckung mit Messwerten keinen Einfluss auf die Qualität der Rekonstruktion hat. Damit ist dann auch der Anstieg von χ nachvollziehbar, wenn man sich den konstanten Verlauf von σ_m im Zusammenhang mit Gleichung (5.21) betrachtet. σ_m stellt nämlich ein mit der Anzahl der Freiheitsgrade $N_{\text{row}} - N_{\text{col}}$ normiertes χ dar. Da N_{row} mit der Anzahl der Einzelmessungen zunimmt und N_{col} und σ_m konstant bleiben, dann muss χ einen Wert annehmen, der Gleichung (5.21) erfüllt.

Eine andere Möglichkeit, die Größe der überlappenden Bereiche zu beeinflussen, als über

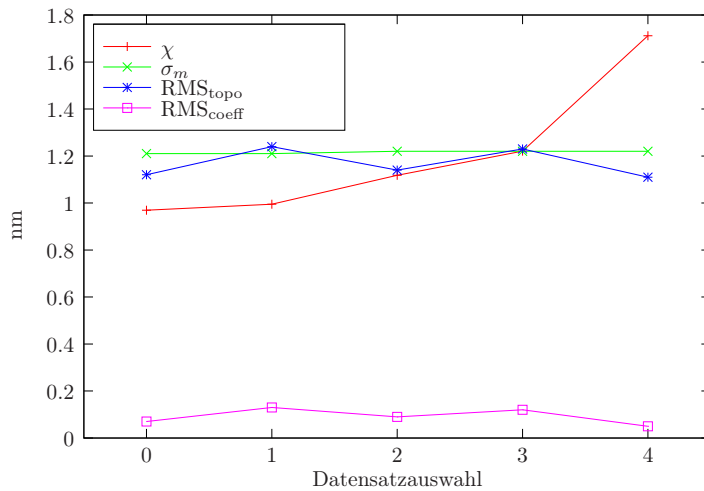


Abbildung 5.9: Abhängigkeit der Bewertungskriterien χ , σ_m , $\text{RMS}_{\text{coeff}}$ und RMS_{topo} von der Größe der überlappenden Bereiche benachbarter Einzelmessungen. Die Datensatzauswahlen 0 bis 4 entsprechen den Messstrategien aus Abbildung 5.8.

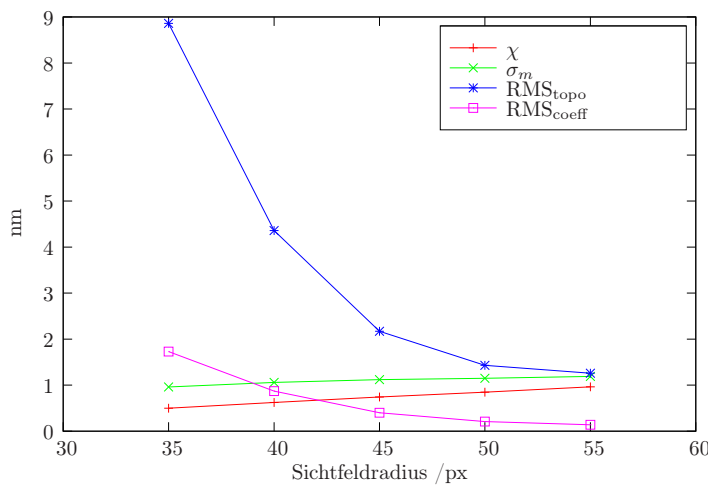


Abbildung 5.10: Abhängigkeit der Bewertungskriterien χ , σ_m , $\text{RMS}_{\text{coeff}}$ und RMS_{topo} von der Größe des Sichtfeldradius.

die Anzahl der Einzelmessungen besteht darin, die Größe des Sichtfelds künstlich einzuschränken. Dies ist im Experiment zum Beispiel dann der Fall, wenn nur der Zentralbereich der Optik verwendet wird. Die Ergebnisse sind für mehrere Rechendurchläufe am Beispiel des Abdeckungsschemas aus Abbildung 5.8(b) mit unterschiedlichen Sichtfeldradien in Abbildung 5.10 aufgetragen. Bei einem kleinen Sichtfeld – also bei sehr wenig Überlapp benachbarter Messungen – ist die Übereinstimmung zwischen rekonstruierter und simulierter Topografie sehr schlecht, was man besonders an RMS_{topo} sehen kann. Aber auch $\text{RMS}_{\text{coeff}}$ nähert sich erst bei dem maximalen Sichtfeldradius von 56 px an Null an. σ_m und χ werden dagegen vergleichsweise wenig beeinflusst, was der Erwartung entspricht, dass diese Größen mehr ein Maß für die Bewertung der Eingangsdaten und des Modells sind. Bemerkenswert ist vor diesem Hintergrund jedoch, dass das Modell selbst dann noch ein Ergebnis liefert, wenn die Überlappungsbereiche so sehr reduziert werden, dass sogar Lücken in der Kugelabdeckung entstehen, wie es zum Beispiel bei einem Sichtfeldradius von 35 px der Fall ist (vgl. Abbildung 5.11). Erst wenn man grös-

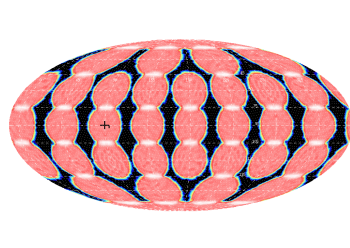


Abbildung 5.11: Die Messstrategie aus Abbildung 5.8(b) mit einem auf 35px eingeschränkten Sichtfeldradius. Die schwarzen Bereiche sind Lücken und enthalten keine Messwerte.

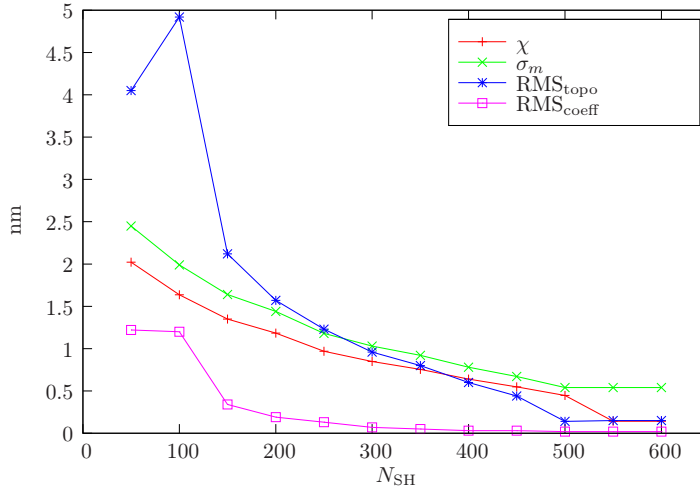


Abbildung 5.12: Abhängigkeit der Bewertungskriterien χ , σ_m , RMS_{coeff} und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Kugelflächenfunktionen N_{SH} .

re Flächen auslässt, indem zum Beispiel mehrere benachbarte Messungen ganz entfernt werden, kann der Stitching-Algorithmus kein sinnvolles Resultat mehr liefern.

Eine grundsätzliche Abhängigkeit von der Größe der überlappenden Bereiche lässt sich jedoch nicht feststellen.

5.3.4 Einfluss der Parameteranzahl

Bei der Variation der Anzahl der in der Rekonstruktion einbezogenen Parameter ist ein Einfluss auf das Resultat zu erwarten, weil nur die ideale Rekonstruktion wie in Abschnitt 5.3.2 ein exaktes Ergebnis liefern kann. Um dies zu quantifizieren, wurde das Stitching-Verfahren mit dem Messdatensatz 5.8(b), mit einer festen Anzahl von 36 Zernike-Polynomen für die Objekttopografien und mit einer variablen Anzahl von Kugelflächenfunktionen durchgeführt. In Abbildung 5.12 sind die Bewertungsgrößen gegen die jeweils verwendete Anzahl von Kugelflächenfunktionen N_{SH} aufgetragen.

Bis auf eine Irregularität bei $N_{SH} = 100$ nehmen alle Größen monoton ab, wenn die Kugeltopografie mit mehr Kugelflächenfunktionen rekonstruiert wird. Da die simulierte Kugel aus einem Satz von 500 Kugelflächenfunktionen besteht und für die Rekonstruktion bis zu 600 verwendet wurden, lässt sich ab $N_{SH} = 500$ ein plateauartiger Verlauf finden. χ fällt sprunghaft von 0,5 nm auf unter 0,2 nm und σ_m bleibt annähernd konstant knapp

oberhalb der simulierten Messunsicherheit von 0,5 nm stehen, wie es auch schon bei der Idealrekonstruktion in Abschnitt 5.3.2 festgestellt wurde. Die RMS-Abweichung der Koeffizienten wird nahezu Null, wobei die Null nicht exakt erreicht wird, weil die simulierten Objektivtopografien mit jeweils nur 25 Zernike-Polynomen nicht exakt angepasst werden können. Gleiches gilt für die RMS-Abweichung der Topografie selbst, die allerdings auch nur an 8412 Stellen ausgewertet wird und damit auf keiner lückenlosen Abtastung basiert. Das erklärt, warum RMS_{topo} nicht so kleine Werte annimmt wie $\text{RMS}_{\text{coeff}}$.

Festzuhalten bleibt die grundsätzliche Beobachtung, dass sich alle Größen schon bei Verwendung einiger hundert Kugelflächenfunktionen von mehreren Nanometern auf Werte von weniger als 1 nm reduzieren. Sieht man einmal von dem ohnehin begrenzten Spektrum der simulierten Kugeltopografie ab, dann ist dem Verlauf der Kurven zu entnehmen, dass eine weitere Steigerung der Parameteranzahl nur unwesentlich zu einer Verringerung der Fehler beiträgt. Außerdem darf N_{SH} nicht beliebig groß sein, um eine Überanpassung zu vermeiden. Die Obergrenze wird durch das Abtasttheorem festgelegt, so dass die Ordnung der Kugelflächenfunktionen nicht größer sein darf als die Hälfte der Anzahl von Messwerten entlang eines Großkreises [97]. Durch Verwendung von nur wenig mehr als der notwendigen Anzahl von 500 Kugelflächenfunktionen kommt es nicht sofort zu einer fehlerhaften Überanpassung, aber im Ergebnis der Koeffizienten und deren Unsicherheiten ist deutlich zu sehen, dass zu viele Parameter in die Rechnung eingebracht wurden. Abbildung 5.13 zeigt dazu das mit 600 Kugelflächenfunktionen rekonstruierte Amplitudenspektrum der Kugeltopografie und dessen absolute und relative Unsicherheiten. Es ist zu erkennen, dass ab einem Index von 500 die Koeffizientenwerte nahezu Null sind – idealerweise wären sie exakt Null – und die Unsicherheiten ähnliche Werte annehmen wie bei kleineren Indizes. Der oszillierende Verlauf der Unsicherheiten bei großen Indizes ist vermutlich eine numerische Anomalie, die nicht nur in diesem Fall, sondern auch bei anderen Rekonstruktionsvorgängen immer wieder auftaucht. Die relativen Unsicherheiten aber machen durch den sprunghaften Anstieg auf Werte um 1 herum sofort deutlich, dass ab dem Index 500 überflüssige Parameter in die Rekonstruktion eingegangen sind, weil die absoluten Unsicherheiten bei kleinen Werten bleiben. In der Praxis wird dieser Fall voraussichtlich so nicht eintreten, so lange das Spektrum nicht künstlich begrenzt ist, sondern es werden allenfalls vereinzelte Parameter vorkommen, bei denen die relative Unsicherheit nahe bei 1 oder darüber liegt, wenn der jeweilige Koeffizient keinen Beitrag zum Spektrum liefert, so wie es auch in Abbildung 5.13 bei einigen Indizes (kleiner als 500) zu sehen ist. Grundsätzlich ist es auch denkbar, eine Schwelle für die relative Unsicherheit festzulegen, bei deren Überschreiten die zugehörige Kugelflächenfunktion aus dem Parametersatz entfernt und für eine Wiederholung der Rekonstruktion durch einen höherfrequenten Beitrag ersetzt wird. Diese (auch iterativ durchführbare) Herangehens-

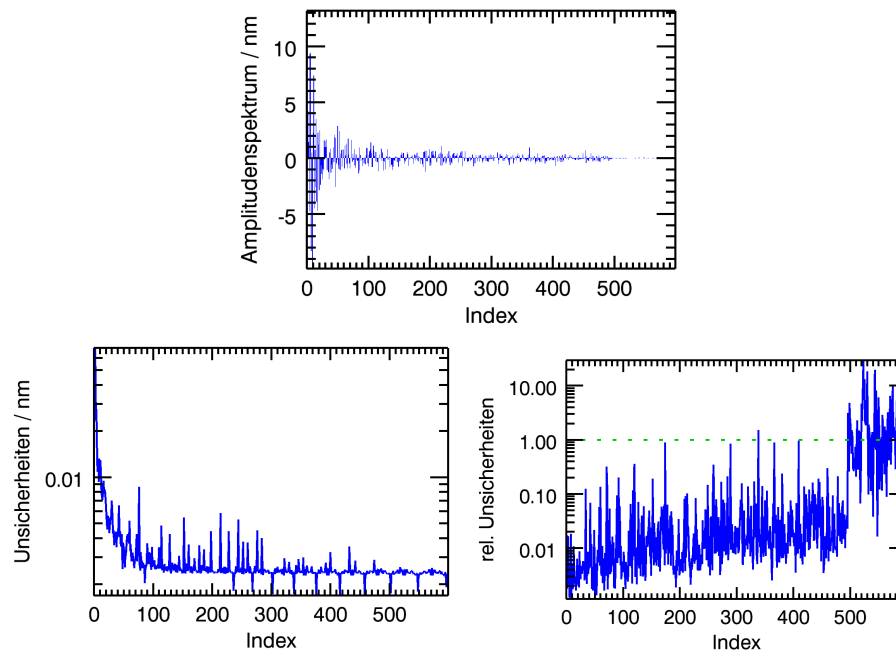


Abbildung 5.13: Beispielergebnis für eine Überanpassung der simulierten Topografie bei $N_{SH} = 600$. Dargestellt sind der Lösungsvektorteil der Koeffizienten der Kugelflächenfunktionen als Amplitudenspektrum und die zugehörigen absoluten und relativen Unsicherheiten mit logarithmisch skaliert y-Achse.

weise lohnt sich aber nur dann, wenn bereits im zu Beginn gewählten Parametersatz viele niederfrequente Anteile als überflüssig bewertet werden und erst durch Hinzuziehen hochfrequenter Kugelflächenfunktionen ein gewünschtes Ergebnis zu erwarten ist.

Zusammenfassend zeichnet sich für den praktischen Einsatz an den wirklichen Messungen also ab, dass bei einer Zielvorgabe von zum Beispiel $RMS_{topo} \leq 1 \text{ nm}$ einige hundert Kugelflächenfunktionen eine geeignete Wahl darstellen, um die Rekonstruktion einer Radiustopografie mit Abweichungen im Bereich der Nanometer- zur Subnanometerschwelle zu ermöglichen.

5.3.5 Einfluss von Fehleranteilen

In den bisherigen Unterabschnitten wurde nur der Einfluss der für die Rekonstruktion gut wählbaren Parametern wie der Grad der Parametrisierungen betrachtet, wobei der simulierte Datensatz unverändert bleiben konnte. Die im Experiment nicht so einfach kontrollierbaren Fehleranteile – Offset, Kippungen, Defokus und Rauschen – setzen voraus, dass sie bereits bei der Erzeugung des simulierten Datensatzes berücksichtigt werden. Um die Variation nicht unübersichtlich werden zu lassen, werden besagte Größen während der in Abschnitt 5.3.1 beschriebenen Datensatzerzeugung der Einfachheit halber mit demselben

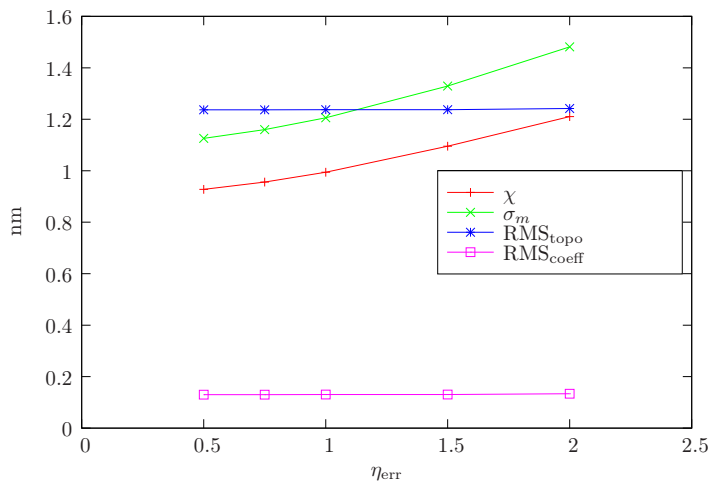


Abbildung 5.14: Abhängigkeit der Bewertungskriterien χ , σ_m , RMS_{coeff} und RMS_{topo} von dem bei der Erzeugung der simulierten Topografie verwendeten Skalierungsfaktor η_{err} .

Skalierungsfaktor η_{err} versehen. Der bisher verwendete simulierte Datensatz ergibt sich mit $\eta_{err} = 1$. Für die Untersuchung der Abhängigkeit eines Stitching-Resultats von der Größe der Fehlereinflüsse wurde die Rekonstruktion für simulierte Datensätze mit unterschiedlichen Werten von η_{err} durchgeführt. Die übrigen Parameter sind wie in Abschnitt 5.3.2 gewählt.

In Abbildung 5.14 ist zu sehen, dass die Variation der Fehlereinflussgrößen keine Veränderung an der Qualität der rekonstruierten Topografie bewirkt. RMS_{topo} und RMS_{coeff} bleiben nahezu konstant. Lediglich in σ_m und χ spiegelt sich die Fehlerskalierung wider. Dass σ_m nicht exakt dem skalierten Rauschanteil entspricht, liegt an der „unvollkommenen“ Rekonstruktion mit nur 250 Kugelflächenfunktionen und 25 Zernike-Polynomen. Daher ist zu beachten, dass σ_m nur bei ausreichend vielen Rekonstruktionsparametern die Unsicherheit der Eingabedaten wiedergibt. Grundsätzlich hat sich aber gezeigt, dass Modell und Algorithmus auch mit Fehlern behaftete Eingabedaten korrekt behandeln können.

5.4 Radiustopografien der gemessenen Kugeln

Nach der ausführlichen Behandlung der simulierten Daten folgt nun eine auszugsweise Darstellung der Ergebnisse von rekonstruierten Kugeltopografien, die auf den wirklichen Messdatensätzen aus Abschnitt 3.6 basieren. Für die absolute Referenzierung der rekonstruierten Kugelform wird dabei jeweils auf den in Tabelle 3.2 auf Seite 33 bereits angegebenen mittleren Durchmesser zurückgegriffen. Für die Überprüfung, ob das jeweilige Ergebnis auch der Realität entspricht, liegen zwar nicht wie im vorherigen Abschnitt bekannte simulierte Eingangsdaten vor, aber für eine Ergebnisüberprüfung kann man die sich beim Stitching ergebenden Durchmesser – also die Summe der gegenüber liegenden Radien – radial zentrieren, so dass sich eine Übereinstimmung mit der Durchmesser-

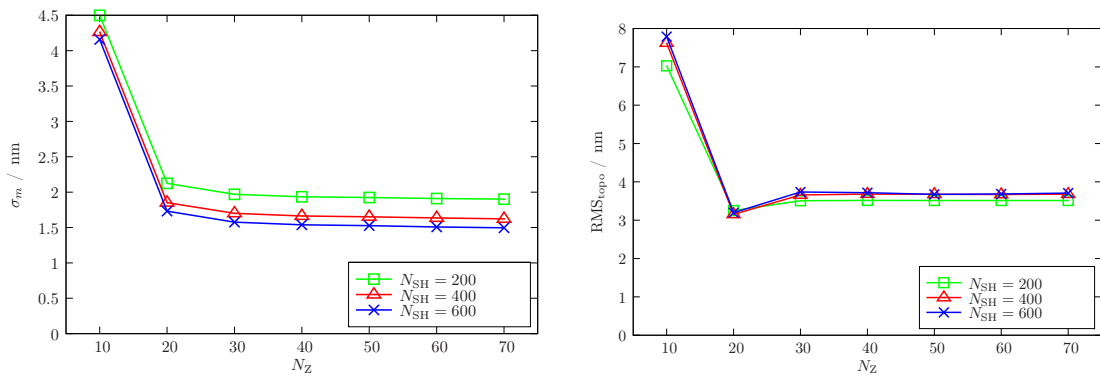


Abbildung 5.15: Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion der Objektiv-Referenzflächen einbezogenen Anzahl von Zernike-Polynome N_Z . Die Kurven geben jeweils den Verlauf für $N_{\text{SH}} = 200$, $N_{\text{SH}} = 400$ bzw. $N_{\text{SH}} = 600$ an. Grundlage bilden die Messdaten der Kugel Avo28-S8.

pografie aus Abschnitt 3.6 zeigen sollte. Auch in diesem Fall können wieder die RMS-Abweichung der beiden Topografien und σ_m als Bewertungskriterien dienen. Für einen zusätzlichen Vergleich lassen sich abschließend noch die Ergebnisse von Rundheitsmessungen heranziehen, die am CSIRO direkt nach der Herstellung der Kugeln durchgeführt worden sind.

5.4.1 Vorüberlegungen

Die Tatsache, dass die zu rekonstruierende Topografie unbekannt ist, kam beim simulierten Datensatz noch nicht zur Geltung. Erst bei den wirklich gemessenen Kugeln wird es interessant, in welcher Weise sich die bisher erhaltenen Durchmesserstopografien von den Radiustopografien unterscheiden. Ein anderer Aspekt gewinnt ebenfalls an Bedeutung: Wie viele Zernike-Polynome sind nötig oder sinnvoll für die Rekonstruktion der Objektiv-Referenzflächen? Um für die Beantwortung dieser Frage zunächst eine Abschätzung zu ermöglichen, wurden am Beispiel der Daten von Kugel Avo28-S8 Rekonstruktionen für verschiedene Werte von N_Z durchgeführt und die Ergebnisse in Abbildung 5.15 verglichen. Aufgetragen gegen die Anzahl der Zernike-Polynome N_Z sind sowohl σ_m als auch die RMS-Abweichung zwischen radial zentrierter Radiustopografie und der Durchmesserstopografie RMS_{topo} für verschiedene Anzahlen an Kugelflächenfunktionen N_{SH} . Es ist festzustellen, dass die Werte von σ_m und RMS_{topo} unabhängig von der Größe von N_{SH} für $N_Z > 30$ nahezu konstant bleiben oder sich allenfalls noch um Bruchteile von Zehntelnanometern verändern. Bei kleineren N_Z ist die Parametrisierung offensichtlich noch nicht gut genug, um eine vernünftige Rekonstruktion zu erlauben. Für alle weiteren Stitching-Vorgänge wurde mindestens $N_Z = 50$ gewählt.

Aus Abschnitt 5.3.3 ist bekannt, dass zwar die Größe der Überlappbereiche der Einzel-

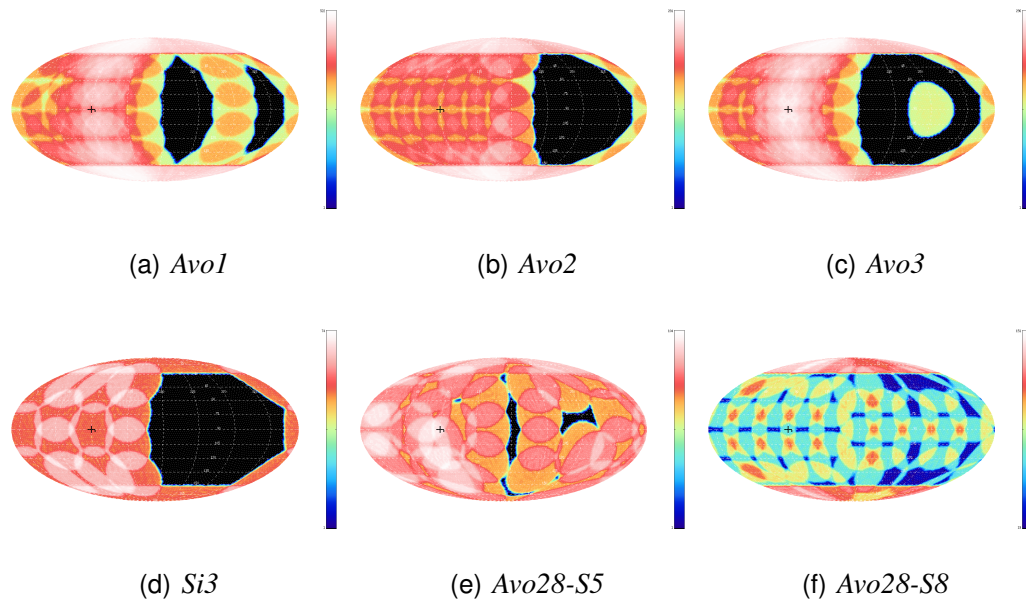


Abbildung 5.16: Messwertverteilungen der gemessenen Kugeldatensätze, die sich bei Beschränkung auf die Messungen mit Interferometerarm 1 ergeben. Die Verteilung für Arm 2 erhält man daraus durch Punktspiegelung am Kugelmittelpunkt. Kombiniert man die beiden separierten Verteilungen, ergeben sich die Messwertverteilungen aus den Abbildungen 3.13 bis 3.18.

messungen das Rekonstruktionsergebnis nicht beeinflusst, die Entstehung von größeren Lücken hingegen ein Problem darstellen kann. Im Gegensatz zu den simulierten Messdatensätzen, die so konzipiert sind, dass jeder Interferometerarm für sich die Kugel mit Messungen komplett abdeckt, sind bei den wirklichen Messungen diesbezüglich zum Teil erhebliche Defizite vorhanden. Dies hängt insbesondere damit zusammen, dass einerseits zum Zeitpunkt der älteren Messungen noch nicht das Ziel der Radiusrekonstruktion verfolgt wurde und andererseits auch der nötige größere Messaufwand teilweise nicht in dem engen Zeitrahmen unterzubringen war, in dem die Kugeln jeweils zur Verfügung standen. Abbildung 5.16 zeigt für die gemessenen Kugeln jeweils die Messwertverteilung, die Interferometerarm 1 zuzuordnen ist. *Avo28-S8* ist dabei die einzige Kugel, die lückenlos abgedeckt ist. Bei *Avo28-S5* sind nur vergleichsweise kleine Lücken vorhanden. Dies hat zur Folge, dass für alle anderen Kugeln ein Stitching-Vorgang mit den Daten nur eines einzelnen Interferometerarms nicht durchführbar und eine Kombination der Daten beider Arme zwingend notwendig ist. Am Beispiel von *Avo1* sind in Abbildung 5.17 σ_m und RMS_{topo} gegen die Anzahl der Kugelflächenfunktionen N_{SH} für einen Stitching-Vorgang mit den Daten von Arm 1, einen mit den Daten von Arm 2 und einen mit den kombinierten Datensätzen aufgetragen. Es ist zu sehen, dass sich zwar σ_m gutmütig verhält, RMS_{topo} hingegen nur für den kombinierten Datensatz von beiden Armen den nach unten kon-

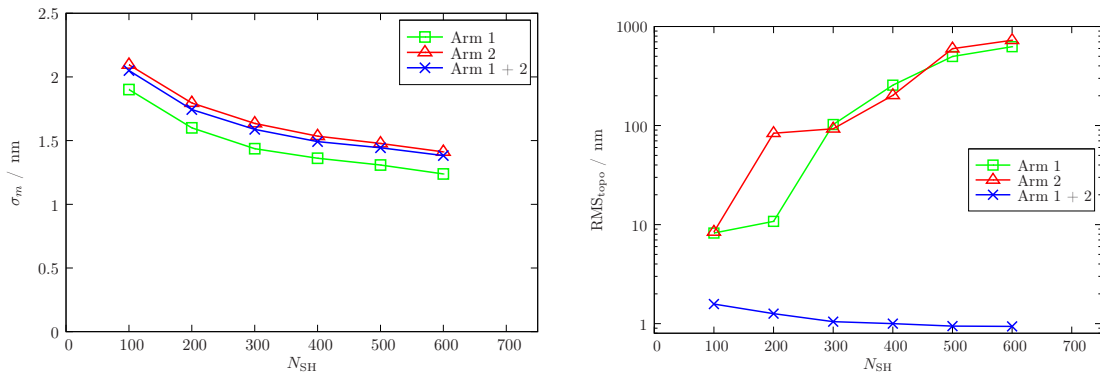


Abbildung 5.17: Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Kugelflächenfunktionen N_{SH} bei $N_Z = 60$. Die Kurven geben jeweils den Verlauf für die Rekonstruktion mit dem Datensatz von Interferometerarm 1, Interferometerarm 2 bzw. beide kombiniert an. Grundlage bilden die Messdaten der Kugel *Avo1*.

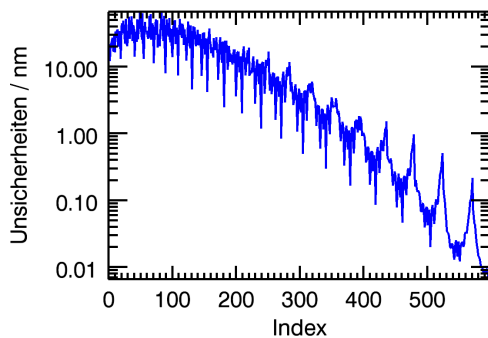


Abbildung 5.18: Grafische Darstellung der Unsicherheiten für die Koeffizienten der Kugelflächenfunktionen aus einer Rekonstruktion auf Grundlage der Messdaten von Kugel *Avo1* allein mit Interferometerarm 1 bei $N_{SH} = 600$ und $N_Z = 60$.

vergierenden Verlauf aufweist, während die separierten Datensätze stark zu großen RMS-Abweichungen tendieren (man beachte die logarithmische Skalierung der y-Achse). Auch in der Darstellung der Unsicherheiten, die für einige Parameter bis zu 100 nm betragen, ist sofort zu erkennen, dass kein korrektes Ergebnis zu erwarten ist (vgl. Abbildung 5.18). Doch auch selbst die kleinen Lücken bei *Avo28-S5* können zu fehlerhaften Resultaten führen, was in Abbildung 5.19 deutlich wird. σ_m verhält sich in allen drei Fällen wie es nach Abschnitt 5.3.4 zu erwarten ist. RMS_{topo} hingegen verringert sich nur für den kombinierten Datensatz bei zunehmendem N_{SH} gegen einen Grenzwert, während die anderen zwei Kurven starken Schwankungen unterliegen und bei $N_{SH} = 400$ sogar einen Ausreißer nach oben aufweisen. In diesem Fall ist die Rekonstruktion komplett fehlgeschlagen, wie an der rekonstruierten Topografie in Abbildung 5.20 zu sehen ist. Zwar ist die eigentliche Topografie im dunkel- bis hellblauen Bereich zu erkennen, aber der durch den Parametersatz der Kugelflächenfunktionen gleichzeitig beschriebene hellrote Peak verfälscht nicht nur einzelne Koeffizienten. Der dominierende Peak liegt gerade an einer Stelle in der Topografie, an der die Messwertabdeckung eine Lücke aufweist (vgl. Abbildung 5.16(e)).

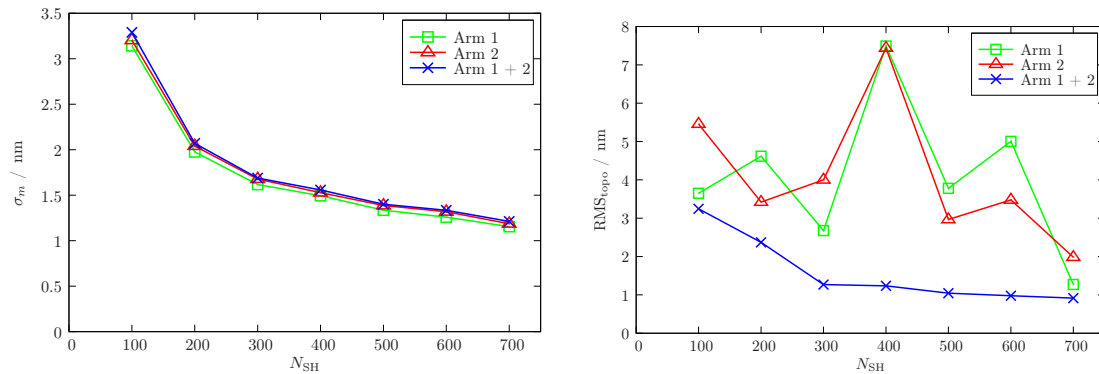


Abbildung 5.19: Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Kugelflächenfunktionen N_{SH} bei $N_Z = 60$. Die Kurven geben jeweils den Verlauf für die Rekonstruktion mit dem Datensatz von Interferometerarm 1, Interferometerarm 2 bzw. beide kombiniert an. Grundlage bilden die Messdaten der Kugel Avo28-S5.

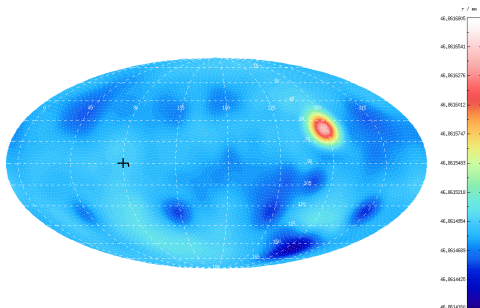


Abbildung 5.20: Beispiel für eine fehlgeschlagene Rekonstruktion auf Grundlage der Messdaten von Kugel Avo28-S5 mit Interferometerarm 1 bei $N_{\text{SH}} = 400$ und $N_Z = 60$. Der hellrote Peak befindet sich an einer Stelle, an der eine Lücke in der Abdeckung mit Messwerten liegt. Der P-V-Wert beträgt rund 220 nm.

Sind die Daten von Arm 1 und 2 kombiniert, lässt sich eine solche Fehlrekonstruktion vermeiden.

Aber auch im Fall der komplett mit Messwerten abgedeckten Kugel Avo28-S8 ist es sinnvoll, die Messdaten der beiden Arme nicht separiert zu berücksichtigen. Abbildung 5.21 zeigt dazu wieder den entsprechenden Verlauf von σ_m und RMS_{topo} abhängig vom Grad der Parametrisierung. Vergleicht man die Kurven für die separierten Datensätze, ist zwar einerseits der ungefähr parallele Verlauf festzustellen, andererseits aber bei RMS_{topo} ein Unterschied im Offset von etwa 4,5 nm. Das bedeutet, dass die radial zentrierte Topografie, die aus den Daten von Arm 2 hervorgeht, geringer von der Durchmesser-Topografie abweicht, als die zu Arm 1 gehörende radial zentrierte Topografie. Die gleiche Einschätzung liefert das nach Gleichung (5.25) bestimmte Gütemaß. Bei $N_{\text{SH}} = 700$ und $N_Z = 60$ ergibt sich zum Beispiel ein Wert von 0,73 nm für Arm 1, 0,52 nm für Arm 2 und 0,67 nm für die Kombination. Der Unterschied ist auch direkt in Abbildung 5.22 zu erkennen, wenn die beiden Stitching-Ergebnisse nebeneinander gestellt sind. An mehreren Stellen weichen die charakteristischen Merkmale der Topografien voneinander ab. Im Fall von Avo28-S5, wo aus Abbildung 5.19 ein deutlich kleinerer Unterschied der RMS-Abweichungen der

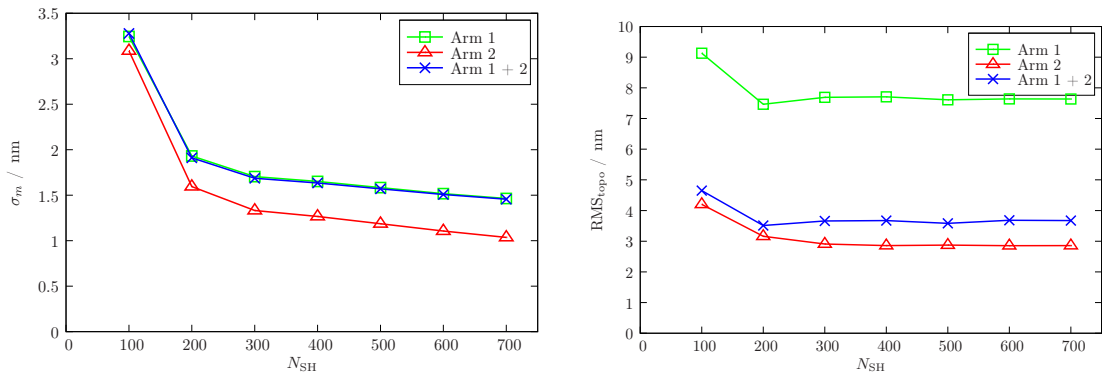


Abbildung 5.21: Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Kugelflächenfunktionen N_{SH} bei $N_Z = 60$. Die Kurven geben jeweils den Verlauf für die Rekonstruktion mit dem Datensatz von Interferometerarm 1, Interferometerarm 2 bzw. beide kombiniert an. Grundlage bilden die Messdaten der Kugel *Avo28-S8*.

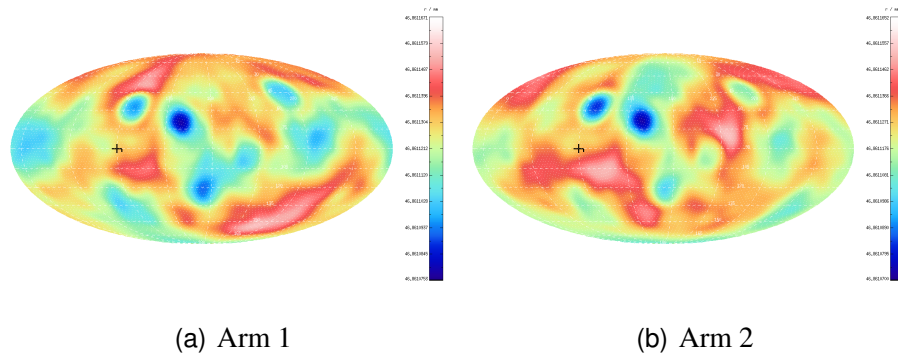


Abbildung 5.22: Rekonstruierte Radiustopografien auf Grundlage der Messdaten von Kugel *Avo28-S8* mit Interferometerarm 1 und Interferometerarm 2 separiert bei $N_{SH} = 700$ und $N_Z = 60$. Die Farbskala umfasst einen Bereich von rund 70 nm.

Datensätze von beiden Armen zu entnehmen ist, ist auch die Ähnlichkeit der Topografie-darstellungen größer (vgl. Abbildung 5.23). Das Gütemaß beträgt hier bei $N_{SH} = 700$ und $N_Z = 60$ 1,04 nm für Arm 1, 1,07 nm für Arm 2 und 0,71 nm für die Kombination, weist also auf die deutliche Verbesserung hin. Noch deutlicher wird es bei $N_{SH} = 600$, wo die Werte von RMS_{topo} stärker voneinander abweichen. Man findet für das Gütemaß 3,05 nm für Arm 1, 3,20 nm für Arm 2 und 0,75 nm für die Kombination.

Angeichts der vielen unterschiedlichen Randbedingungen, die im Laufe der Jahre während der Erzeugung der hier aufgeführten Messdatensätze vorhanden waren, wobei das Interferometer fortwährend Änderungen unterzogen wurde, ist es schwierig, einen Grund für die große Diskrepanz der separierten Datensätze von *Avo28-S8* anzugeben. Eine Möglichkeit mag die unterschiedlich stark ausgeprägte Topografie der Objektiv-Referenzflächen in Kombination mit der jeweiligen Kugeltopografie sein. Denn im Ge-

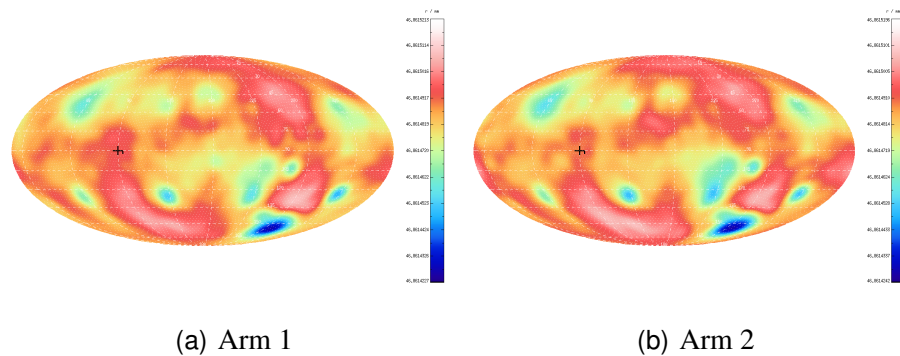


Abbildung 5.23: Rekonstruierte Radiustopografien auf Grundlage der Messdaten von Kugel *Avo28-S5* mit Interferometerarm 1 und Interferometerarm 2 separiert bei $N_{SH} = 700$ und $N_Z = 60$. Die Farbskala umfasst einen Bereich von rund 80 nm.

gensatz zu einem idealen Strahlengang, bei dem Hin- und Rückweg exakt übereinstimmen, sorgt die Krümmung der reflektierenden Flächen im Experiment dafür, dass die einfallenden Strahlen nicht exakt in sich zurück reflektiert werden. Je stärker die vorhandenen Krümmungen sind, desto größer fallen die sogenannten „retrace error“ aus, die nur mit Hilfe von aufwändigen Ray-Tracing-Simulationen charakterisiert werden können [74]. Im Zusammenhang damit kommt als weiterer Grund für die Abweichungen erschwerend hinzu, dass das Interferometer während der Messung von *Avo28-S8* möglicherweise nicht ideal justiert war. Die beiden Kugeln *Avo28-S5* und *Avo28-S8* aus ^{28}Si haben einen um rund $50\text{ }\mu\text{m}$ größeren Radius als die Kugeln aus natürlichem Silizium, wodurch sie im Interferometer auf der Dreipunktauflage der anderen Kugeln zu hoch im Strahlengang liegen. Das hatte es bei der Messung von *Avo28-S8* notwendig gemacht, die Objektive zur Justierung der Streifenlosigkeit nachzuführen. Für die Messung von *Avo28-S5* wurde eine angepasste Dreipunktauflage verwendet, so dass die Objektive ihre exakte Justierung beibehalten konnten.

Die Kombination der Datensätze beider Interferometerarme stellt jedenfalls nicht einfach eine „Mittelung“ der separierten Ergebnisse dar, sondern macht in einigen Fällen die Stitching-Auswertung überhaupt erst möglich (z. B. *Avo1*), kann das Resultat deutlich verbessern (z. B. *Avo28-S5*) oder bewirkt wie bei der Messung von *Avo28-S8* eine minimale Verschlechterung der RMS-Abweichung. Da jedoch für die Bestimmung des absoluten Durchmessers ohnehin die Messwerte beider Seiten benötigt werden, erscheint es vernünftig, auch im letzteren Fall auf die Kombination zurückzugreifen.

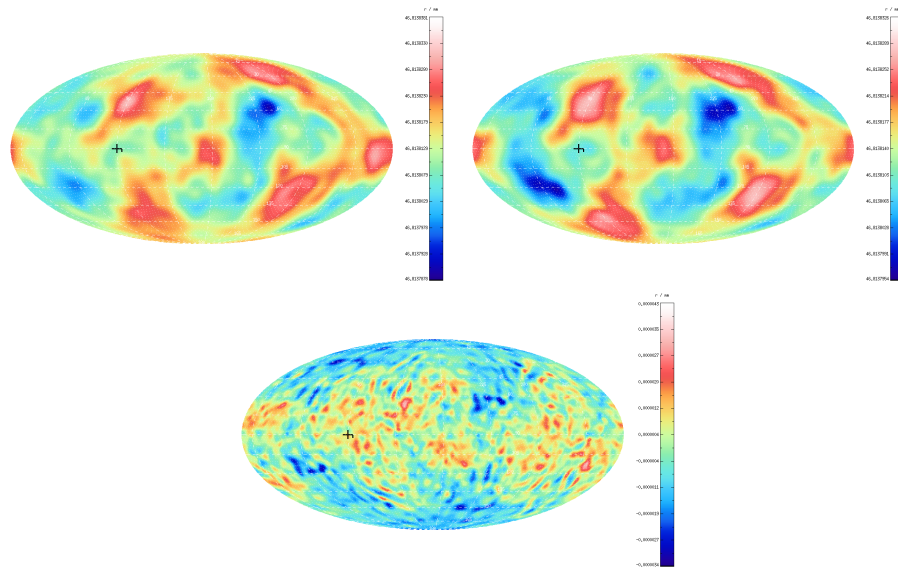


Abbildung 5.24: Darstellung der mit $N_{SH} = 650$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel Avo1, der daraus erhaltenen radial zentrierten Topografie und deren Differenz zur in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.1 und 5.2 entspricht.

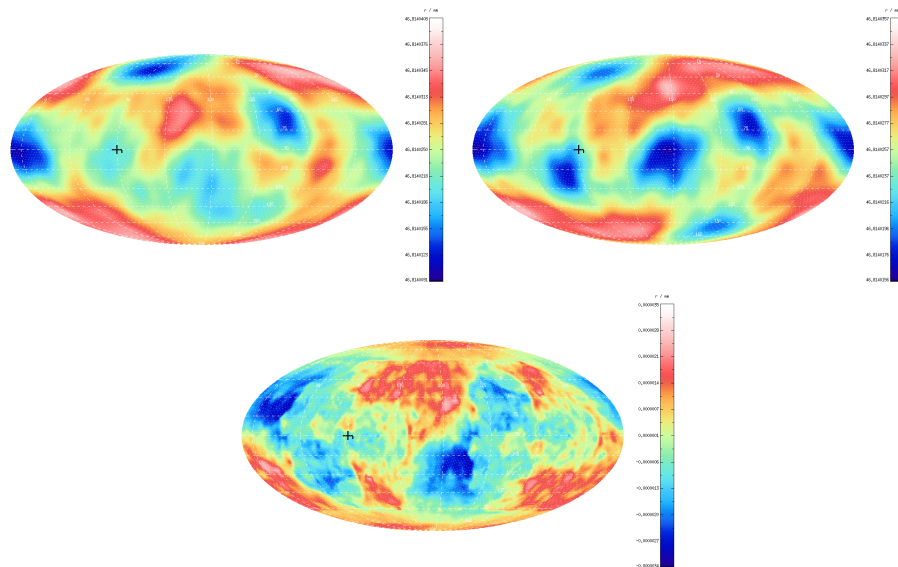


Abbildung 5.25: Darstellung der mit $N_{SH} = 650$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel Avo2, der daraus erhaltenen radial zentrierten Topografie und deren Differenz zur in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.1 und 5.2 entspricht.

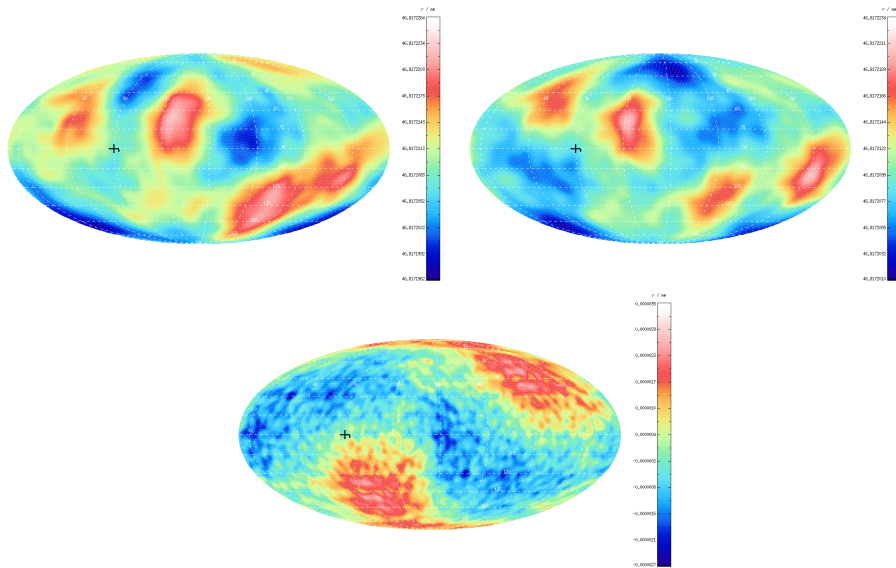


Abbildung 5.26: Darstellung der mit $N_{SH} = 650$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel Avo3, der daraus erhaltenen radial zentrierten Topografie und deren Differenz zur in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.1 und 5.2 entspricht.

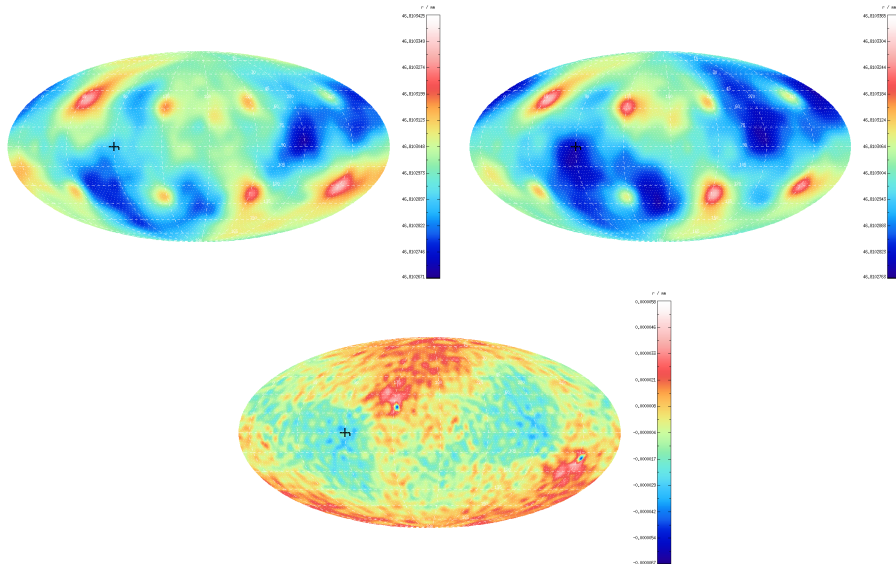


Abbildung 5.27: Darstellung der mit $N_{SH} = 800$ und $N_Z = 60$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel Si3, der daraus erhaltenen radial zentrierten Topografie und deren Differenz zur in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.1 und 5.2 entspricht.

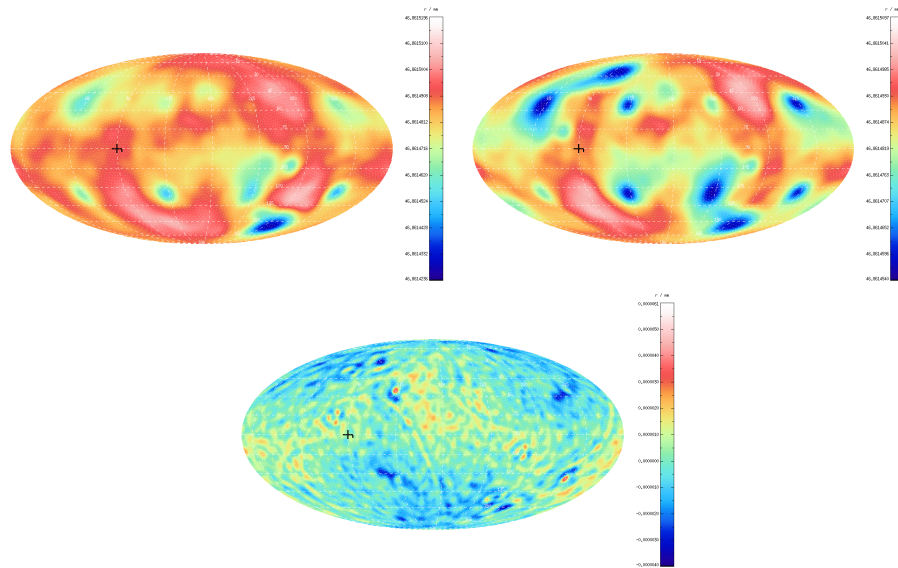


Abbildung 5.28: Darstellung der mit $N_{SH} = 700$ und $N_Z = 60$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel Avo28-S5, der daraus erhaltenen radial zentrierten Topografie und deren Differenz zur in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmesserstopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.1 und 5.2 entspricht.

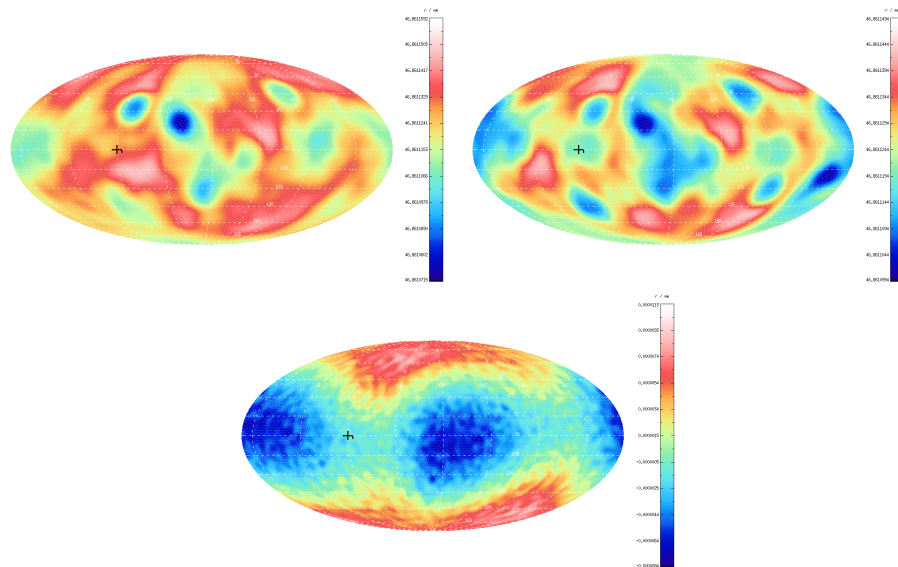


Abbildung 5.29: Darstellung der mit $N_{SH} = 700$ und $N_Z = 60$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel Avo28-S8, der daraus erhaltenen radial zentrierten Topografie und deren Differenz zur in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmesserstopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.1 und 5.2 entspricht.

	r_{Mittel} / mm	r_{Min} / mm	r_{Max} / mm	P-V / nm
<i>Avo1</i>	46,8138139	46,8137899	46,8138322	42,3 (30,7)
<i>Avo2</i>	46,8140256	46,8140105	46,8140371	26,6 (16,0)
<i>Avo3</i>	46,8172103	46,8171975	46,8172228	25,4 (19,3)
<i>Si3</i>	46,8102971	46,8102703	46,8103336	63,4 (50,1)
<i>Avo28-S5</i>	46,8614858	46,8614276	46,8615083	80,7 (48,4)
<i>Avo28-S8</i>	46,8611255	46,8610751	46,8611489	73,8 (44,3)

Tabelle 5.1: Mittlere Radien r_{Mittel} , minimale und maximale Werte r_{Min} bzw. r_{Max} und die entsprechenden P-V-Werte der in den Abbildungen 5.24 bis 5.29 dargestellten Radiustopografien. Zum Vergleich sind in Klammern zusätzlich die P-V-Werte der Durchmessertopografien aus Tabelle 3.2 angegeben.

	Δr_{Min} / nm	Δr_{Max} / nm	P-V / nm	RMS _{topo} / nm
<i>Avo1</i>	-3,1	3,4	6,5	0,9
<i>Avo2</i>	-3,1	2,7	5,8	1,1
<i>Avo3</i>	-2,4	2,8	5,2	1,0
<i>Si3</i>	-6,2	4,4	10,5	1,3
<i>Avo28-S5</i>	-3,6	4,9	8,5	0,9
<i>Avo28-S8</i>	-7,5	9,0	16,5	3,7

Tabelle 5.2: Minimale und maximale Radiusabweichung Δr_{Min} bzw. Δr_{Max} , der entsprechende P-V-Wert und globale RMS-Abweichung RMS_{topo} zu den in den Abbildungen 5.24 bis 5.29 gezeigten Differenzdarstellungen.

5.4.2 Ergebnisse mit Kugelflächenfunktionen

Es folgt eine Aufstellung der Ergebnisse, die auf den bisher gemessenen Kugeldatensätzen basieren und nach der Methode aus Abschnitt 5.2.1 verarbeitet wurden. Die Abbildungen 5.24 bis 5.29 zeigen jeweils die rekonstruierte Radiustopografie, die daraus erhaltene radial zentrierte Topografie und deren Differenz zur in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen der Radiustopografien umfassen jeweils einen Bereich, der dem zugehörigen P-V-Wert aus Tabelle 5.1 entspricht. Zusätzlich sind in der Tabelle analog zu Abschnitt 3.6 die mittleren Radien, die denen der Durchmessertopografien entsprechen, und die Minima und Maxima angegeben. Auf Grund des unterschiedlichen Umfangs der Messdatensätze und des damit verbundenen variierenden Arbeitsspeicherbedarfs sind für die Rekonstruktion auch unterschiedliche Grade der Parametrisierung zur Anwendung gekommen. Details dazu sind in den Bildunterschriften aufgeführt. Bei allen Kugeln ist in unterschiedlicher Ausprägung zu sehen, dass die Radius- und Durchmessertopografien voneinander abweichen. Dies fällt besonders da ins Auge, wo blaue oder

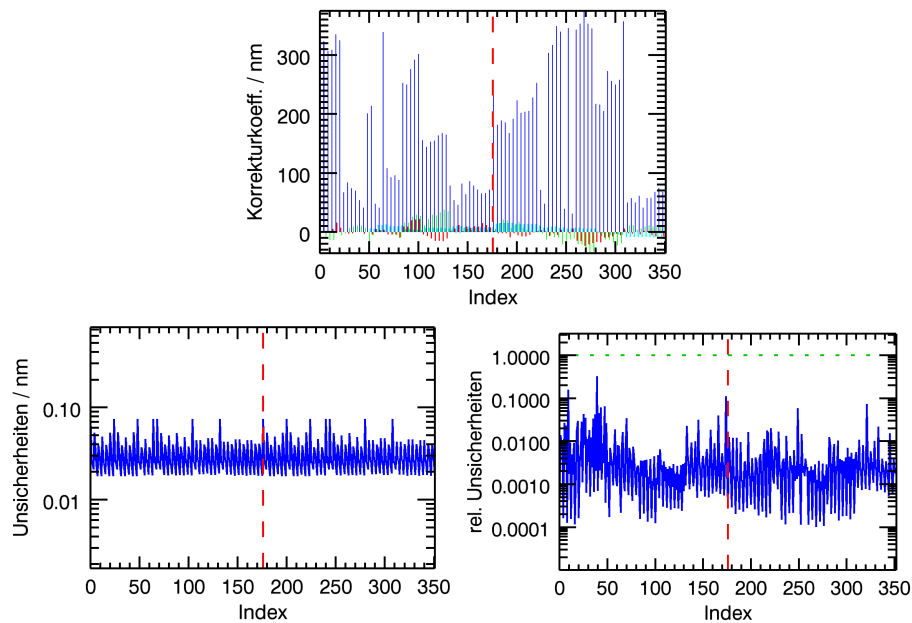


Abbildung 5.30: Grafische Darstellung des Lösungsvektorteils der Korrekturkoeffizienten für die Rekonstruktion der Messdaten von Kugel *Avo28-S8* bei $N_{SH} = 700$ und $N_Z = 60$ und die zugehörigen absoluten und relativen Unsicherheiten.

hellrote Strukturen in der Radiustopografie einseitig und in der Durchmesserstopografie symmetrisch auf gegenüberliegenden Seiten der Kugel auftreten. Während in der Durchmesserstopografie keine eindeutige Zuordnung möglich war, legt die Radiustopografie fest, auf welcher Kugel­seite eine Vertiefung oder Erhöhung lokalisiert ist.

Zum quantitativen Vergleich der zentrierten und der nach Abschnitt 3.3 ausgewerteten Topografie ist zu jeder Kugel zusätzlich die ortsabhängige Differenz grafisch dargestellt. Der Wertebereich, der von der Farbskala angegeben wird, ist in Tabelle 5.2 als P-V-Wert aufgeführt. Da dies aber nur die maximale Abweichung an einzelnen Positionen der Kugel­topografien beschreibt, sind zusätzlich die RMS-Abweichungen benannt, die eine Gesamtbewertung ermöglichen. Bis auf *Avo28-S8*, bei der auch die stärkste elliptische Verzerrung in der Differenzdarstellung zu finden ist (vgl. Abbildung 5.29), liegt RMS_{topo} in der Nähe von 1 nm. Einen Grund für die im Vergleich zu den anderen Kugeln stärkere Abweichung der rekonstruierten Topografie liefert die bereits in der Diskussion zu Abbildung 5.21 erwähnte Tatsache, dass die Justierung der Objektive während der Messung nicht ideal war, was möglicherweise zu der Verzerrung führt.

In den grafischen Darstellungen der Lösungsparameter in den Abbildungen 5.30 bis 5.32, die sich bei der Rekonstruktion von *Avo28-S8* ergeben, ist allerdings keine Auffälligkeit zu erkennen – egal ob man einen separierten oder kombinierten Datensatz verwendet. Dargestellt sind jeweils die Werte der Parametervektoren und ihre absoluten und relativen

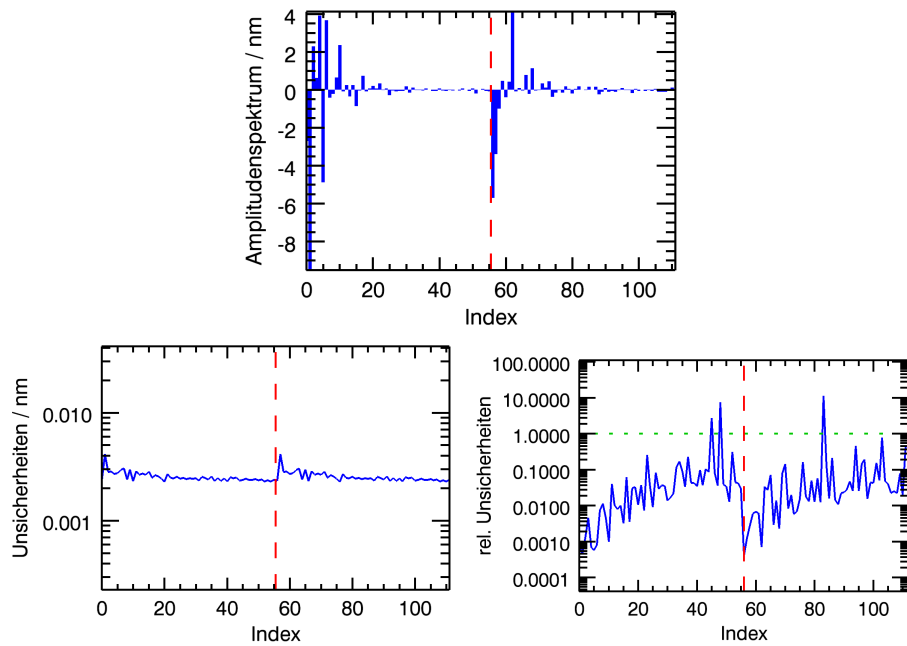


Abbildung 5.31: Grafische Darstellung des Lösungsvektorteils der Koeffizienten der Objektiv-Referenzflächen für die Rekonstruktion der Messdaten von Kugel Avo28-S8 bei $N_{SH} = 700$ und $N_Z = 60$ und die zugehörigen absoluten und relativen Unsicherheiten.

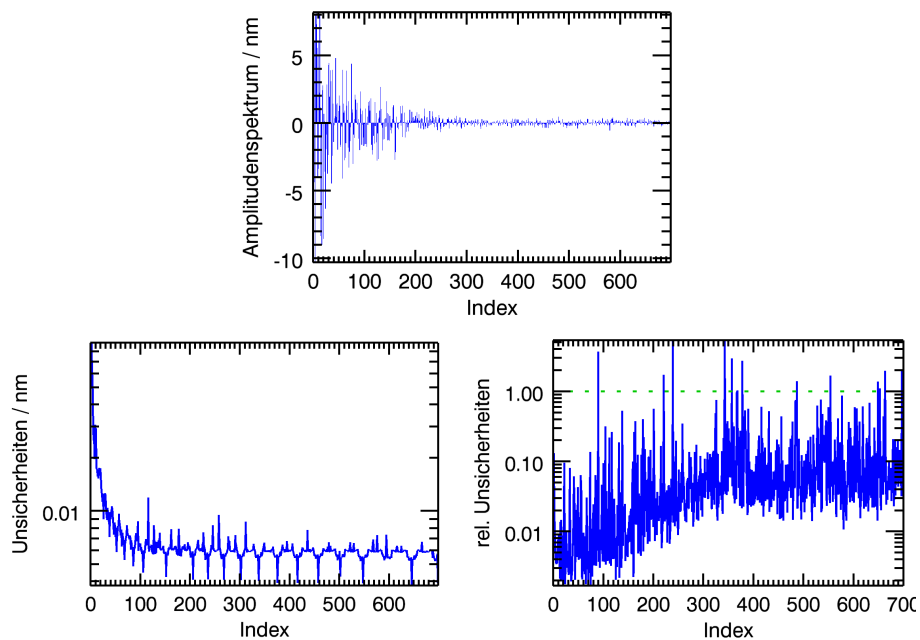


Abbildung 5.32: Grafische Darstellung des Lösungsvektorteils der Koeffizienten der Kugeltopografie für die Rekonstruktion der Messdaten von Kugel Avo28-S8 bei $N_{SH} = 700$ und $N_Z = 60$ und die zugehörigen absoluten und relativen Unsicherheiten.

Unsicherheiten. Für die Korrekturkoeffizienten liegen die Unsicherheiten alle im Bereich zwischen einem zehntel und einem hundertstel Nanometer. Die Unsicherheiten der Referenzflächenrekonstruktion liegen noch eine Größenordnung darunter, wobei die relativen Unsicherheiten von drei Parametern den Wert 1 überschreiten. Das ist in diesem Fall aber weniger auf einen Fehler als vielmehr auf die Tatsache zurück zu führen, dass die Parameterwerte selbst nahe bei Null liegen und eigentlich in der Anpassung überflüssig sind. Da es sich aber nur um drei von mehr als 100 Parametern handelt, kann dies vernachlässigt werden. Die Unsicherheiten der Kugeltopografiekoefizienten umfassen einen Bereich von 0,004 nm bis 0,1 nm. Genau wie in Abbildung 5.13 sind auch in diesem Fall wieder um den Grenzwert schwankende Oszillationen zu finden, die vermutlich numerisch bedingt sind. Die relativen Unsicherheiten weisen wie bei den Objektivkoeffizienten auf einige überflüssige Parameter hin. Allerdings ist die Anzahl ebenfalls vernachlässigbar gering, so dass keine Anpassung des Parametersatzes notwendig ist. Ein Hinweis auf einen Grund für die elliptische Verzerrung lässt sich, wie schon erwähnt, in keiner der Kurven finden. Vielmehr handelt es sich sogar um ein repräsentatives Beispiel, weil die Ergebnisse für die anderen Kugeln vergleichbar aussehen.

Die Differenzdarstellungen in den Abbildungen 5.26 und 5.27 von *Avo3* bzw. *Si3* weisen zwar eine ähnliche elliptische Grundform auf wie bei *Avo28-S8*, diese beträgt aber nur rund 30 % bzw. 60 % der Größe im Vergleich zu *Avo28-S8* und schlägt sich nicht in einer größeren RMS-Abweichung nieder. Die Differenzen für *Avo1* (Abbildung 5.24) und *Avo28-S5* (Abbildung 5.28) hingegen sind eher von einem noppenartigen Muster gezeichnet, so dass keine globale Verzerrung dominiert. Dieser Befund stützt die Vermutung, die Ursache für die Verzerrung in einer nicht idealen Justierung finden zu können, weil lediglich bei den Messungen von *Avo1* und *Avo28-S5* eine Dreipunktauflage mit korrekter Höhenposition vorhanden war, während bei den anderen Kugeln die Objektive nachgeführt wurden. Das Ergebnis von *Avo2* wird hier bei der Diskussion ausgelassen, weil die zugehörigen Messungen – die im Übrigen die ältesten sind – noch mit nicht speziell für den Vakuumeinsatz geeigneten Objektiven durchgeführt wurden.

Aus den präsentierten Ergebnissen lässt sich zusammenfassend folgern, dass das Stitching-Verfahren nach Abschnitt 5.2.1 fähig ist, die eigentliche Form der Kugel zu rekonstruieren. Einerseits deutet der Verlauf von σ_m auf Messwertunsicherheiten hin, die denen des Unsicherheitsbudgets entsprechen, und andererseits zeigt die RMS-Abweichung zur jeweiligen Durchmessertopografie, dass Werte von 1 nm und weniger erreichbar sind. In Kombination mit dem absoluten Durchmesser aus Abschnitt 3.6 erhält man an Stelle der reinen Formabweichung die absolute Radiustopografie. Auch wenn hier keine Unsicherheitsangaben auf der Basis von Monte-Carlo-Rechnungen genannt werden können, weisen die vorgestellten Größen wie P-V-Werte und RMS-Abweichungen darauf

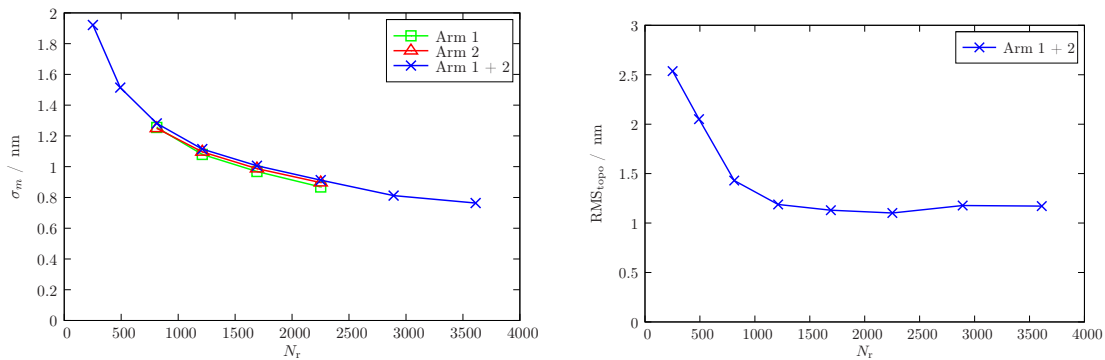


Abbildung 5.33: Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Rekonstruktionspunkten N_r bei $N_Z = 50$. Die Kurven geben jeweils den Verlauf für die Rekonstruktion mit dem Datensatz von Interferometerarm 1, Interferometerarm 2 bzw. beide kombiniert an. Grundlage bilden die Messdaten der Kugel *Si3*.

hin, dass die Unsicherheit der Ergebnisse bei wenigen Nanometern liegt.

5.4.3 Ergebnisse mit Rekonstruktionspunkten

Um auch die Stitching-Methode mit den Rekonstruktionspunkten auf Datensätze von gemessenen Kugeln anzuwenden, wurden die folgenden Ergebnisse nach der in Abschnitt 5.2.2 beschriebenen Modellvariante ausgewertet. Dabei kam für die Interpolation das „Inverse distance weighting“ an Stelle der einfachen „Nearest-neighbor interpolation“ zur Anwendung.

Als erstes Beispiel dient hier abweichend vom letzten Abschnitt nicht das Resultat von *Avol*, sondern wegen der deutlich geringeren Anzahl von Messungen das von *Si3*. Anderenfalls wäre es vor dem Hintergrund des limitierten Arbeitsspeichers nicht möglich gewesen, die Anzahl der Rekonstruktionspunkte N_r auf über 3000 für die Kombination der Datensätze von Arm 1 und Arm 2 zu bringen. Abbildung 5.33 zeigt den Verlauf von σ_m und RMS_{topo} in Abhängigkeit von N_r . Weil *Si3* eine der Kugeln ist, die von einem einzelnen Interferometerarm nicht komplett abgedeckt wird, ist es bei der Stitching-Variante mit den Rekonstruktionspunkten nicht möglich, eine zentrierte Radiustopografie zu erzeugen. Denn wenn man die separierten Datensätze einzeln betrachtet, existieren zu einem großen Teil keine gegenüber liegenden Radien. Folglich ist in einem solchen Fall auch keine RMS-Abweichung zu berechnen, sondern nur für die Kombination beider Interferometerarme, deren Ergebnis in Abbildung 5.33 gezeigt ist. Bei mehr als 1500 Rekonstruktionspunkten ändert sich RMS_{topo} nur noch unwesentlich, was mit der Erkenntnis aus Abschnitt 4.2 in Einklang steht, dass bereits wenige tausend Vertizes die Topografie hinreichend genau beschreiben können.

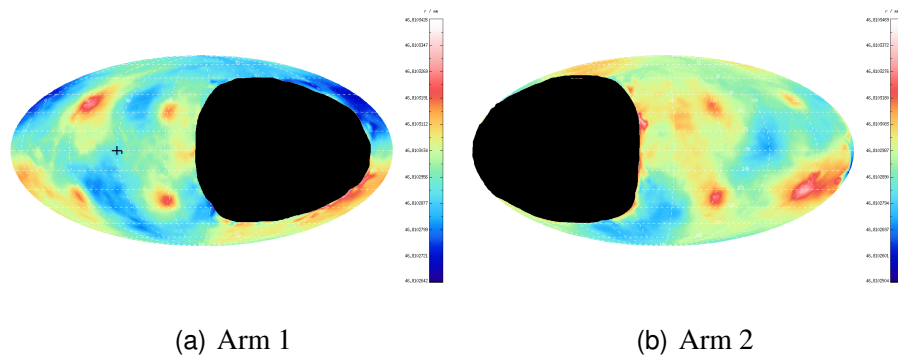


Abbildung 5.34: Rekonstruierte Radiustopografien auf Grundlage der Messdaten von Kugel Si_3 mit Interferometerarm 1 und Interferometerarm 2 separiert bei $N_r = 1492$ und $N_z = 50$. Wegen der lückenhaften Abdeckung mit Messwerten sind nur 1492 der insgesamt 2252 Rekonstruktionspunkte mit Werten belegt und im Lösungsvorgang berücksichtigt.

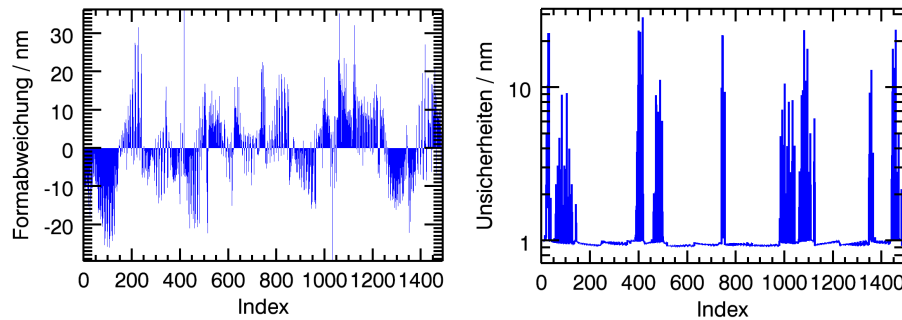


Abbildung 5.35: Grafische Darstellung des Lösungsvektorteils der Koeffizienten der Kugeltopografie für die Rekonstruktion der Messdaten von Kugel Si_3 mit Interferometerarm 1 bei $N_r = 1492$ und $N_z = 50$ und die zugehörigen absoluten Unsicherheiten.

Obwohl RMS_{topo} für die separierten Datensätze nicht sinnvoll ermittelt werden kann, bedeutet es nicht, dass wie bei der Stitching-Variante mit den Kugelflächenfunktionen nur weitgehend lückenlose Datensätze verarbeitet werden können. In Abbildung 5.34 sind als Beispiel dafür die aus der Rekonstruktion erhaltenen partiellen Radiustopografien der separierten Datensätze dargestellt, in denen sich durchaus die aus Abschnitt 5.4.2 bekannte Topografie wiedererkennen lässt. Lediglich an den Rändern der nicht mit Messwerten abgedeckten Bereiche sind einzelne Rekonstruktionspunkte mit Radiuswerten versehen, die eher als Ausreißer zu werten sind. Dies spiegelt sich in den Unsicherheiten wider, die hier direkt als Unsicherheiten der Radien und nicht nur als die von Entwicklungskoeffizienten wie bei der Variante mit Kugelflächenfunktionen zu betrachten sind. In Abbildung 5.35 sind erstens die rekonstruierten Radiusabweichungen vom mittleren Radius und zweitens deren Unsicherheiten dargestellt. Die Unsicherheiten schwanken in einem Bereich von rund 1 nm bis hinauf zu knapp über 11 nm, wobei die hohen Unsicherheiten zu den

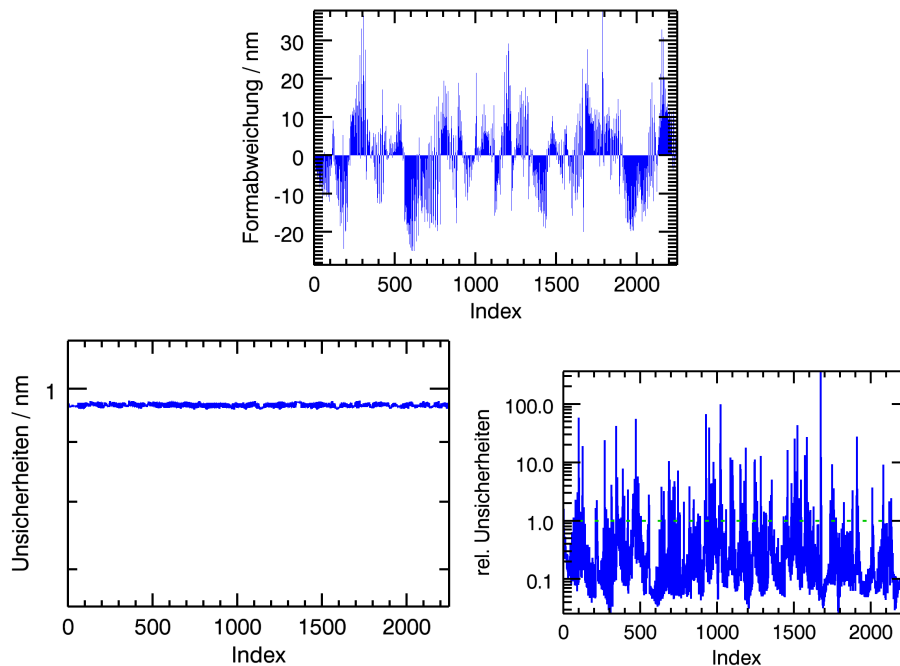


Abbildung 5.36: Grafische Darstellung des Lösungsvektorteils der Koeffizienten der Kugeltopografie für die Rekonstruktion der Messdaten von Kugel *Si3* mit Interferometerarm 1 und 2 kombiniert bei $N_r = 2252$ und $N_z = 50$ und die zugehörigen absoluten und relativen Unsicherheiten.

Rekonstruktionspunkten im Randbereich der Messwertabdeckung gehören. Anders sieht es aus, wenn man auf die Datensatzkombination zurück greift. Die Rekonstruktion mit der Kombination der Daten von beiden Interferometerarmen verbessert das Resultat. Wie in Abbildung 5.36 zu sehen ist, betragen alle Unsicherheiten in diesem Fall nur rund 0,96 nm. Zwar sind bei vielen Parametern die relativen Unsicherheiten größer als 1, aber dies liegt vor allen Dingen daran, dass die Parameterwerte selbst nahe bei 0 liegen, weil die Rekonstruktion um den mittleren Radius herum vollzogen wird. Demnach handelt es sich dabei in diesem Fall nicht um einen Hinweis auf ein schlechtes Stitching-Ergebnis. Prinzipiell ist es also möglich, mit der hier verwendeten Methode auch einseitige Datensätze mit größeren Lücken in der Topografie für eine Rekonstruktion heranzuziehen. Empfehlenswert bleibt jedoch wie bei der Methode mit den Kugelflächenfunktionen die Kombination der Datensätze von Arm 1 und Arm 2.

Um einen direkten Vergleich zu der Variante mit den Kugelflächenfunktionen zu bekommen, folgt eine Betrachtung der Ergebnisse von *Avo28-S8* und *Avo28-S5*. Da bei diesen beiden Kugeln die Oberfläche komplett bzw. fast komplett mit Messwerten abgedeckt ist, kann hierbei RMS_{topo} auch für Arm 1 und Arm 2 separat aufgetragen werden. Die Abbildungen 5.37 und 5.38 zeigen wie in Abschnitt 5.4.2 den Verlauf von σ_m und RMS_{topo} ,

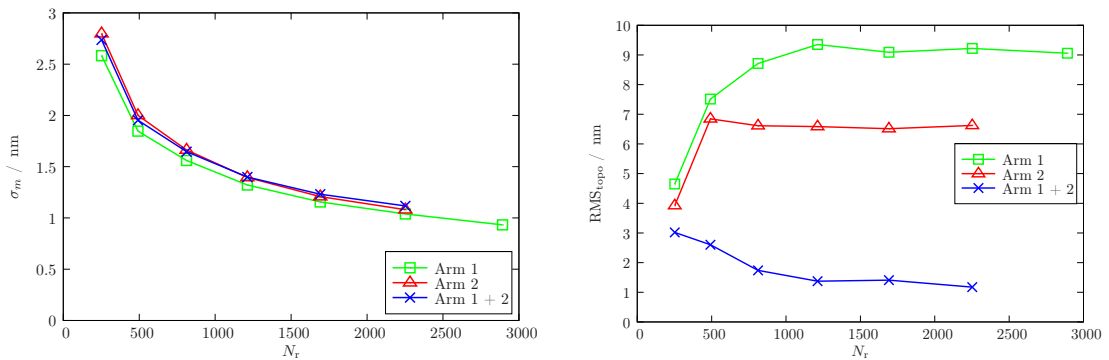


Abbildung 5.37: Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Rekonstruktionspunkten N_r bei $N_Z = 50$. Die Kurven geben jeweils den Verlauf für die Rekonstruktion mit dem Datensatz von Interferometerarm 1, Interferometerarm 2 bzw. beide kombiniert an. Grundlage bilden die Messdaten der Kugel *Avo28-S5*.

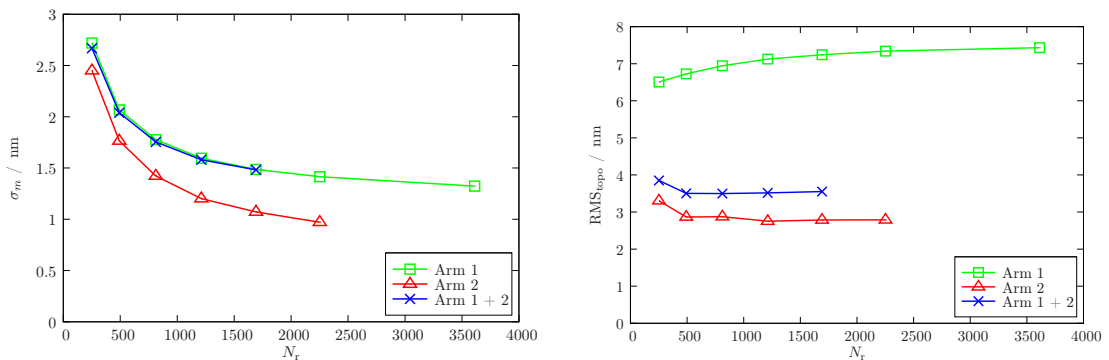


Abbildung 5.38: Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Rekonstruktionspunkten N_r bei $N_Z = 50$. Die Kurven geben jeweils den Verlauf für die Rekonstruktion mit dem Datensatz von Interferometerarm 1, Interferometerarm 2 bzw. beide kombiniert an. Grundlage bilden die Messdaten der Kugel *Avo28-S8*.

aber hier in Abhängigkeit von N_r . Aus Gründen der Laufzeit des Lösungsalgorithmus⁵ und des limitierten Arbeitsspeichers brechen die einzelnen Kurven bei unterschiedlichen Werten von N_{SH} ab. Es lassen sich dennoch auch hier die zentralen Aussagen ableiten und Parallelen zu den Abbildungen 5.19 und 5.21 erkennen, in denen die Auswertung zur Lösung mit den Kugelflächenfunktionen dargestellt ist. Eine Ähnlichkeit findet sich besonders in den Kurvenverläufen von σ_m , die sich auch hier wieder Werten knapp unterhalb von 1 nm bei *Avo28-S5* bzw. 1,5 nm bei *Avo28-S8* annähern. Die Verläufe von RMS_{topo} zeigen hingegen für die separierten Datensätze ein anderes Verhalten als bei der Lösung mit den Kugelflächenfunktionen. So nimmt hier der Unterschied zwischen

⁵Die Laufzeit steigt mit der Anzahl der einbezogenen Zeilen oder Spalten ungefähr in der dritten Potenz an.

	$r_{\text{Mittel}} / \text{nm}$	$r_{\text{Min}} / \text{nm}$	$r_{\text{Max}} / \text{nm}$	P-V / nm
<i>Avo1</i>	46,8138139	46,8137887	46,8138331	44,4 (30,7)
<i>Avo2</i>	46,8140256	46,8140068	46,8140391	32,3 (16,0)
<i>Avo3</i>	46,8172103	46,8171965	46,8172254	28,9 (19,3)
<i>Si3</i>	46,8102971	46,8102684	46,8103390	70,6 (50,1)
<i>Avo28-S5</i>	46,8614858	46,8614245	46,8615105	86,0 (48,4)
<i>Avo28-S8</i>	46,8611255	46,8610775	46,8611519	74,3 (44,3)

Tabelle 5.3: Mittlere Radien r_{Mittel} , minimale und maximale Werte r_{Min} bzw. r_{Max} und die entsprechenden P-V-Werte der in den Abbildungen 5.39 bis 5.44 dargestellten Radiustopografien. Zum Vergleich sind in Klammern zusätzlich die P-V-Werte der Durchmessertopografien aus Tabelle 3.2 angegeben.

den RMS-Abweichungen bei *Avo28-S5* von nahe beieinander liegenden Werten unterhalb von 5 nm mit steigender Anzahl der Rekonstruktionspunkte am Anfang schnell zu und bleibt dann im weiteren Verlauf ungefähr konstant. Zu bedenken bleibt dabei aber, dass die separierten Datensätze eine leicht verfälschte RMS-Abweichung liefern, weil die Abdeckung der Kugel mit nur einem Arm nicht komplett ist. Das hat nämlich zur Folge, dass die Lücken in der Rekonstruktion nicht auftauchen, wenn die Abstände der Rekonstruktionspunkte größer als die Lücken selbst sind, so dass jedem Rekonstruktionspunkt mindestens ein Messwert zugeordnet werden kann. Das erklärt auch den rapiden Anstieg am Anfang. Lediglich der kombinierte Datensatz zeigt die Tendenz einer sich verringern- den RMS-Abweichung, wenn die Anzahl der Rekonstruktionsparameter erhöht wird. Bei der komplett abgedeckten Kugel *Avo28-S8* weicht der RMS-Verlauf für Arm 1 bei klei- nen N_r etwas von dem in Abschnitt 5.4.2 ab. Die anderen beiden Kurven verhalten sich aber ähnlich wie mit den Kugelflächenfunktionen. Die Werte bei größeren N_r entsprechen allerdings für alle drei Kurven den vorherigen Werten und es ist außerdem wieder die Diskrepanz von rund 4,5 nm zwischen den Kurven von Arm 1 und Arm 2 zu sehen.

Es deutet sich also an, dass eine Rekonstruktion mit dem Stitching-Verfahren mindestens einige 1000 Rekonstruktionspunkte einbeziehen sollte, damit sich sowohl σ_m als auch RMS_{topo} mit der Variation von N_r nur noch wenig ändern. Dies steht in Analogie zu dem in Abbildung 4.5 (Abschnitt 4.2, Seite 45) dargestellten Verlauf der Differenz zwischen dem minimalen und dem maximalen auftretenden Durchmesserwert. In der Praxis ist eine Erhöhung von N_r aber nur eingeschränkt möglich, weil für einige der gemessenen Da- tensätze schon bei einigen 100 Rekonstruktionspunkten der vorhandene Arbeitsspeicher erschöpft war. Die unter dieser Einschränkung realisierbaren Stitching-Ergebnisse sind in den Abbildungen 5.39 bis 5.44 aufgeführt. Auf die Darstellung der radial zentrierten Radiustopografie wurde in diesem Fall verzichtet und stattdessen neben der Radiusto-

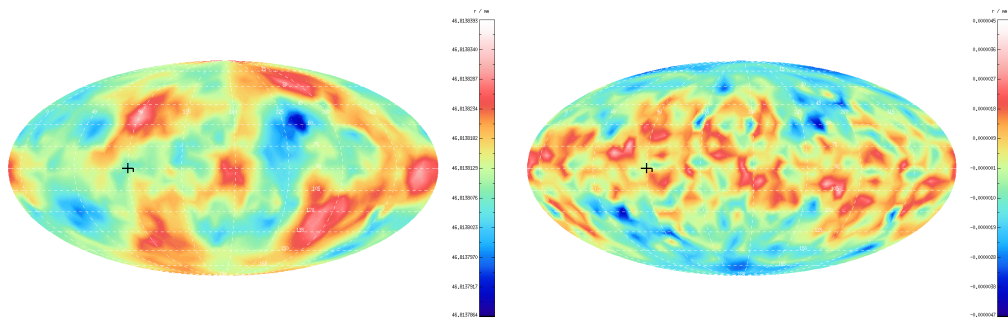


Abbildung 5.39: Darstellung der mit $N_r = 812$ und $N_z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel *Avo1* und der Differenz zwischen zugehöriger radial zentrierter Topografie und der in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.3 und 5.4 entspricht.

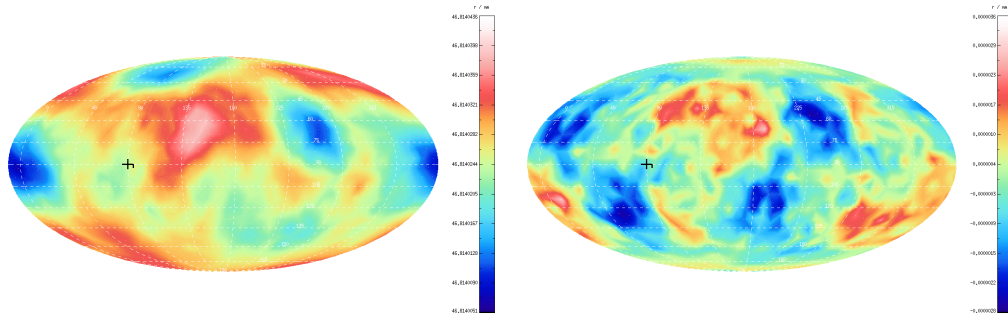


Abbildung 5.40: Darstellung der mit $N_r = 812$ und $N_z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel *Avo2* und der Differenz zwischen zugehöriger radial zentrierter Topografie und der in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.3 und 5.4 entspricht.

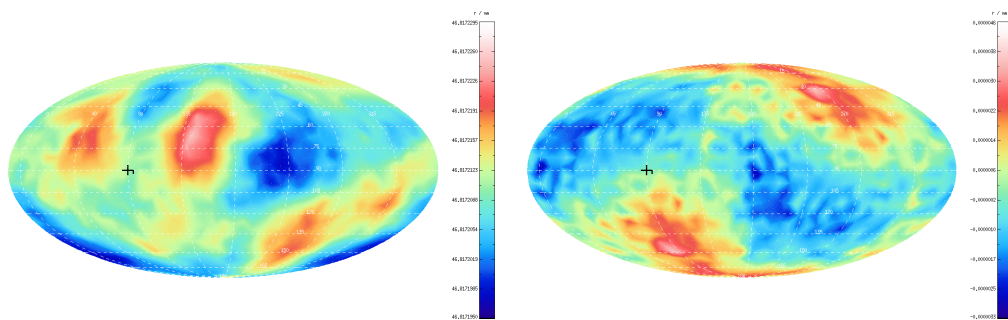


Abbildung 5.41: Darstellung der mit $N_r = 812$ und $N_z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel *Avo3* und der Differenz zwischen zugehöriger radial zentrierter Topografie und der in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.3 und 5.4 entspricht.

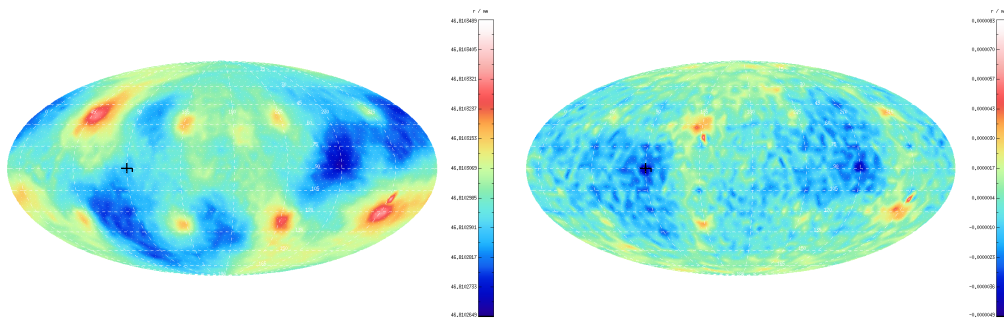


Abbildung 5.42: Darstellung der mit $N_r = 3612$ und $N_z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel *Si3* und der Differenz zwischen zugehöriger radial zentrierter Topografie und der in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.3 und 5.4 entspricht.

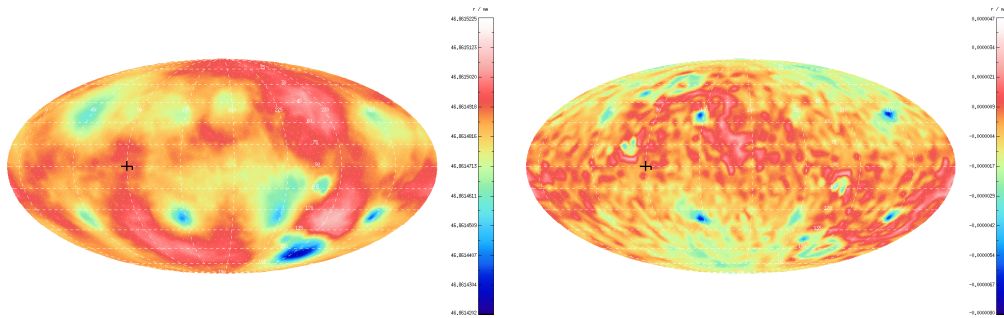


Abbildung 5.43: Darstellung der mit $N_r = 2252$ und $N_z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel *Avo28-S5* und der Differenz zwischen zugehöriger radial zentrierter Topografie und der in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.3 und 5.4 entspricht.

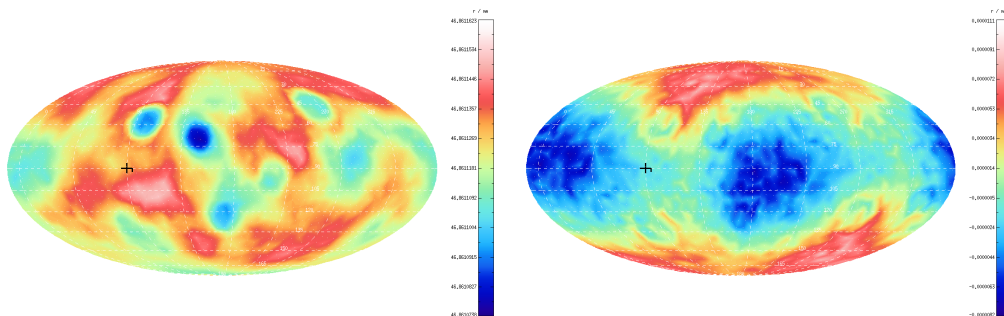


Abbildung 5.44: Darstellung der mit $N_r = 1692$ und $N_z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel *Avo28-S8* und der Differenz zwischen zugehöriger radial zentrierter Topografie und der in Abschnitt 3.6 vorgestellten Durchmessertopografie. Die Farbskalen von Radiustopografie und Differenzdarstellung umfassen einen Bereich, der den zugehörigen P-V-Werten aus den Tabellen 5.3 und 5.4 entspricht.

	$\Delta r_{\text{Min}} / \text{nm}$	$\Delta r_{\text{Max}} / \text{nm}$	P-V / nm	$\text{RMS}_{\text{topo}} / \text{nm}$
<i>Avo1</i>	-4,3	3,5	7,8	1,3
<i>Avo2</i>	-2,6	2,8	5,4	1,0
<i>Avo3</i>	-3,0	3,7	6,6	1,2
<i>Si3</i>	-4,4	6,8	11,1	1,2
<i>Avo28-S5</i>	-7,4	3,2	10,6	1,2
<i>Avo28-S8</i>	-7,4	8,8	16,2	3,6

Tabelle 5.4: Minimale und maximale Radiusabweichung Δr_{Min} bzw. Δr_{Max} , der entsprechende P-V-Wert und globale RMS-Abweichung RMS_{topo} zu den in den Abbildungen 5.39 bis 5.44 gezeigten Differenzdarstellungen.

pografie selbst nur die Differenz der zentrierten Topografie zur Durchmesserstopografie abgebildet. In den Tabellen 5.3 und 5.4 sind die zugehörigen Zahlenwerte angegeben. Auch wenn die laterale Auflösung bei den Kugeln *Avo1*, *Avo2* und *Avo3* mit nur wenigen 100 Rekonstruktionspunkte nicht sehr fein ist, kann man erkennen, dass die Differenzdarstellungen mit denen aus Abschnitt 5.4.2 grundsätzlich übereinstimmen, was Feinstruktur oder elliptische Verzerrung angeht. Dies gilt eingeschränkt auch für die anderen drei Kugeln, bei denen aber noch eine weitere Beobachtung zu machen ist. Besonders bei *Si3* dominieren im Differenzbild nämlich Stellen, die mit den Positionen von spitzen Erhebungen in der Topografie zusammenfallen. Auch bei *Avo28-S5* sind solche Stellen zu finden, die allerdings auf Löcher zurückzuführen sind. Gelänge es, die Anzahl der Parameter wie gewünscht auf einige 1000 zu erhöhen, könnte man den Vorteil der Rekonstruktionspunkte gegenüber den Kugelflächenfunktionen ausnutzen, dass räumlich eingeschränkte Merkmale der Kugeltopografie besser rekonstruiert werden. Die Differenzen bei *Si3* und *Avo28-S5* zeigen, dass die in diesen Fällen benutzten Rekonstruktionspunkte noch nicht ausreichen. Es ist aber zu erwarten, dass sich die in Tabelle 5.4 angegebenen P-V-Werte noch verringern.

Wie bei den in Abschnitt 5.4.2 beschriebenen Ergebnissen kann auch hier zusammengefasst werden, dass das Stitching-Verfahren mit den Rekonstruktionspunkten für die gemessenen Kugeldatensätze funktioniert und die Formabweichungen korrekt rekonstruiert werden. Selbst wenn die Kugeltopografie nicht komplett mit Messwerten abgedeckt wurde, ist es mit der im vorliegenden Abschnitt behandelten Methode möglich, eine Rekonstruktion durchzuführen, wobei lediglich Einbußen in der Genauigkeit an den Randbereichen hinzunehmen sind. Neben den bereits in Abschnitt 5.4.2 verwendeten Kriterien σ_m und RMS_{topo} lassen sich hier als zusätzliche Information für die Ergebnisbewertung die Unsicherheiten der rekonstruierten Einzelradien an den Rekonstruktionspunkten di-

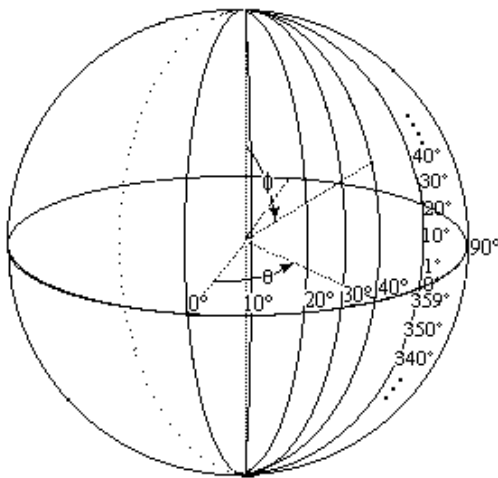


Abbildung 5.45: Schema zum Ablauf der Rundheitsmessungen

rekt nutzen. Wie am Beispiel der Kugel *Si3* gezeigt (vgl. Abbildung 5.36) liegen die Unsicherheiten in der Größenordnung von 1 nm oder noch darunter. Gleiches gilt für die Ergebnisse der anderen Kugeln. Diese Tatsache ist ebenfalls ein Ausdruck für die Genauigkeit der erhaltenen Radiustopografien.

5.4.4 Vergleich mit Rundheitsmessdaten

Die in den voranstehenden Abschnitten vorgestellten Vergleiche der rekonstruierten und anschließend radial zentrierten Radiustopografien mit den Durchmessertopografien aus Abschnitt 3.6 bieten eine Möglichkeit, die erhaltenen Ergebnisse auf ihre Plausibilität zu prüfen. Da beide Topografievarianten aber aus denselben Basisdatensätzen entstehen, ist dieser Test mehr eine Prüfung der Funktionalität des Stitching-Algorithmus. Eine unabhängige Ergebnisbewertung kann nur durch Vergleiche mit anderen Messmethoden erfolgen. Diese Voraussetzung erfüllen zum Beispiel die Resultate der Rundheitsmessungen („roundness measurements“), die am CSIRO direkt nach der Herstellung der Kugeln durchgeführt worden sind. Einige solcher Ergebnisse sind in [15] vorgestellt.

Die Messung der Rundheit eines Objekts bedeutet die Bestimmung der Abweichung von einer vorgegebenen sphärischen oder zylindrischen Form. Im vorliegenden Fall handelt es sich um die radialen Abweichungen von einer idealen Kugel, die durch mehrfaches Antasten an Messpositionen, die auf Großkreisen angeordnet sind, gemessen werden. Das bei den hier betrachteten Messergebnissen zu Grunde liegende Messschema ist in Abbildung 5.45 skizziert. Zunächst wird ein Großkreis als „Äquator“ bestimmt, um anschließend senkrecht dazu weitere 18 Großkreise in Schritten von 10° hinzuzufügen. Jeder der Großkreise besteht dabei aus 36 äquidistanten Messwerten. Mit einem Fit einer Idealkugel an die 648 Messwerte umfassende Punktwolke kann ein Offset subtrahiert werden.

Die Rundheitsmessungen und die im Rahmen dieser Arbeit beschriebenen Durchmesser-messungen wurden in unterschiedlich gewählten Koordinatensystemen durchgeführt, die keinen bekannten Bezug zueinander haben. Grund dafür ist, dass die bei den Durchmesser-messungen als Referenzpunkte dienenden Markierungen auf den Kugeloberflächen zum Zeitpunkt der Rundheitsmessungen noch nicht vorhanden waren. Als Folge daraus sind die Messdaten zunächst nicht direkt zu vergleichen. Abhilfe schafft die Möglichkeit, die charakteristischen Merkmale der Topografien auszunutzen, um eine geeignete Transformation der Koordinatensysteme zu finden, mit der die Ergebnisse im selben Koordinatensystem vergleichbar sind. Konkret muss eine Rotation $\mathbf{T}(\beta)$ mit dem Drehwinkel β gefunden werden, die das Koordinatensystem einer Rundheitsmessung in das der Durchmesser-messungen überführt, indem die Topografien durch Minimierung der globalen Abweichungen passend übereinander gebracht werden. Eine solche Drehung kann in eine Folge von mehreren Einzeldrehungen um verschiedene Drehachsen zerlegt werden, was die Umsetzung anschaulicher macht. Manuell ist dieser Weg der Abweichungs-minimierung allerdings nicht effizient durchführbar. Aus diesem Grund wurde eine Lösung auf Basis der „Amoeba“-Routine (Downhill-Simplex-Algorithmus nach Nelder und Mead [98]) realisiert, die eine Methode zur Optimierung nichtlinearer Funktionen von mehreren Parametern darstellt.

Dazu werden die Rundheitsmesswerte $\vec{\delta r}_i = \delta r_i \cdot (\sin \vartheta_i \cos \varphi_i, \sin \vartheta_i \sin \varphi_i, \cos \vartheta_i)^T$ (mit $i = 1, \dots, N$) an den Koordinaten (ϑ_i, φ_i) gemäß

$$\vec{\delta r}_i' = \mathbf{T}_3(\beta_3) \mathbf{T}_2(\beta_2) \mathbf{T}_1(\beta_1) \vec{\delta r}_i \quad (5.27)$$

um die drei Koordinatenachsen mit den Winkeln β_1 , β_2 und β_3 gedreht, so dass (ϑ_i, φ_i) in $(\vartheta_i', \varphi_i')$ überführt wird. Da außerdem aus Abschnitt 5.4.2 durch das Stitching-Verfahren ein Satz von Koeffizienten $k_{\ell m}$ für die Topografierekonstruktion mit Kugelflächenfunktionen bekannt ist, können nach Gleichung (5.1) an den Koordinaten $(\vartheta_i', \varphi_i')$ die Formabweichungen $\mathcal{R}_r(\vartheta_i', \varphi_i')$ vom mittleren Radius berechnet werden. Abhängig von der Drehtransformation muss dann die Summe der quadrierten Differenzen

$$\mathfrak{D} = \sum_{i=1}^N (\mathcal{R}_r(\vartheta_i', \varphi_i') - \delta r_i')^2 \quad (5.28)$$

minimiert werden, was von der „Amoeba“-Routine erledigt wird. Durch eine geeignete Wahl der Startdrehwinkel kann vermieden werden, dass dabei lediglich ein lokales Minimum erreicht wird, welches nicht zwingend das Ziel der zueinander passenden Topografien erfüllt.

In Abbildung 5.46 sind für die Kugeln *Avo28-S5* und *Avo28-S8* die passend rotierten Messergebnisse der Rundheitsmessungen als Topografien dargestellt. Trotz der nur mit

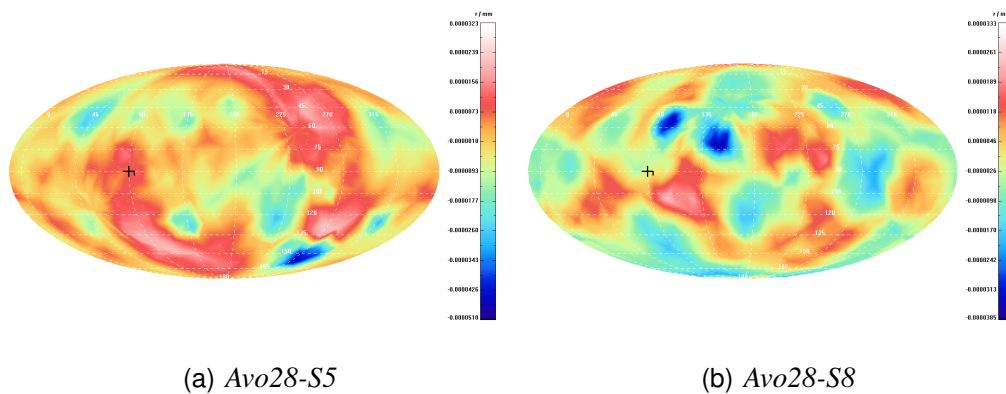


Abbildung 5.46: Ergebnisse der Rundheitsmessungen an den Kugeln *Avo28-S5* und *Avo28-S8*. Die Positionen der Messkoordinaten sind so rotiert, dass die Topografien zu den Stitching-Ergebnissen passen. Der Umfang der Farbskala beträgt 70,0 nm für *Avo28-S5* und 60,4 nm für *Avo28-S8*.

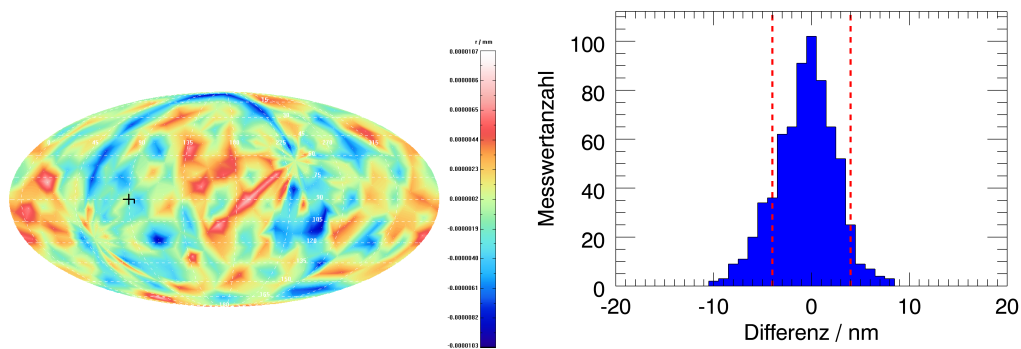


Abbildung 5.47: Nach Gleichung (5.28) berechnete Differenzen an den 648 Messpositionen der Rundheitsmessungen an der Kugel *Avo28-S5* als Topografiedarstellung und als Histogramm. Die Farbskala umfasst einen Bereich von 17,6 nm mit einer RMS-Abweichung über alle Messpositionen von 3,1 nm. Die gestrichelten Linien im Histogramm geben den Bereich der Standardmessunsicherheit der Rundheitsmessungen an. Darin sind rund 85 % der Differenzwerte enthalten.

insgesamt 684 auf den Längengraden verteilten Messwerten geringen lateralen Auflösung sind die in den Abbildungen 5.28 und 5.29 enthaltenen Radiustopografien zu identifizieren. Um eine qualitative Bewertung der Übereinstimmung vorzunehmen, sind in den Abbildungen 5.47 und 5.48 die an den Messpositionen nach Gleichung (5.28) berechneten Differenzen einerseits als Topografie und andererseits als Histogramm aufgetragen. In der Differenzdarstellung zu *Avo28-S5* ist eine halbkreisförmige blaue Furche zu erkennen, die genau entlang eines Längengrades im Koordinatensystem der Rundheitsmessungen verläuft. Die Enden des Halbkreises stimmen mit den beiden Polen dieses Koordinatensystems überein. Die Furche ist auch in Abbildung 5.46(a) als rote, langgezogene Struktur zu finden. Die Übereinstimmung mit dem Längengrad und die Tatsache, dass eine solche

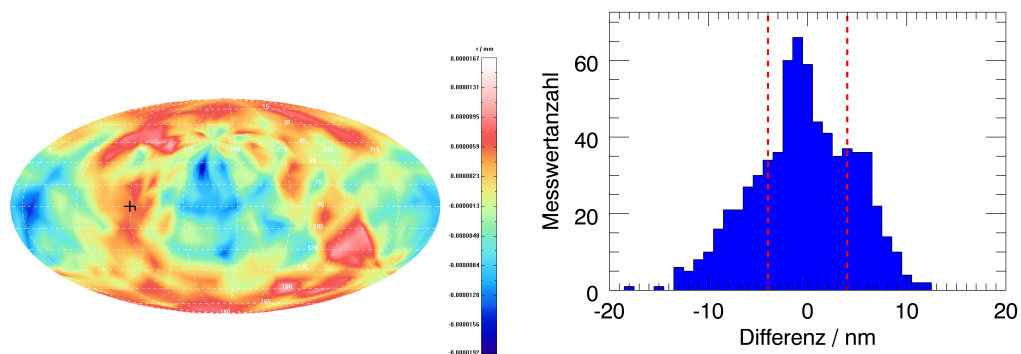


Abbildung 5.48: Nach Gleichung (5.28) berechnete Differenzen an den 648 Messpositionen der Rundheitsmessungen an der Kugel Avo28-S8 als Topografiedarstellung und als Histogramm. Die Farbskala umfasst einen Bereich von 30,2 nm mit einer RMS-Abweichung über alle Messpositionen von 5,1 nm. Die gestrichelten Linien im Histogramm geben den Bereich der Standardmessunsicherheit der Rundheitsmessungen an. Darin sind rund 60 % der Differenzwerte enthalten.

Struktur im Stitching-Ergebnis nicht vorhanden ist, deuten auf einen Messfehler bei der Rundheitsmessung hin. Global betrachtet zeigt sich jedoch keine deutliche systematische Abweichung, sondern eher zufällig verteilte Differenzwerte im Bereich von -9,4 nm bis 8,2 nm mit einer RMS-Abweichung von 3,1 nm. Die entsprechende Werthäufigkeit ist im Histogramm abzulesen. Zusätzlich ist dort durch die gestrichelten Linien der Bereich der am CSIRO erreichten Standardmessunsicherheit von ± 4 nm [15] markiert, die sich allerdings auf mehrere Jahre zurückliegende Messungen bezieht. An dem eingeschlossenen Bereich ist zu erkennen, dass sich die Differenz zu einem überwiegenden Teil (rund 85 %) innerhalb der Unsicherheitsgrenzen befindet. Im Unterschied dazu weist die Differenzdarstellung für die Kugel Avo28-S8 in Abbildung 5.48 eine global hervortretende Struktur auf, die mit -17,7 nm bis 12,5 nm einen größeren Wertebereich und auch eine größere RMS-Abweichung von 5,1 nm hat. Trotzdem bleibt dabei die Struktur, die den Messspuren der Rundheitsmessungen entspricht, deutlich erkennbar (u. a. der Pol am oberen Rand). Im zugehörigen Histogramm ist zu sehen, dass im markierten Unsicherheitsbereich hier nur rund 60 % der Werte liegen. Dieser Befund ist zu erahnen, wenn man sich die Differenzdarstellung aus Abbildung 5.29 in Erinnerung ruft, in der eine ähnliche Grundform auftaucht, was Position und Ausdehnung der Bereiche minimaler und maximaler Differenz angeht. Nun bleibt aber zu berücksichtigen, dass die Unsicherheit der über Rundheitsmessungen bestimmten Formabweichungen je nach Anwendungszweck üblicherweise im Bereich von 10 nm bis 100 nm liegt [99]. Bei sehr präzisen Messungen in der PTB wurden 6 nm erreicht [100], ohne aber dieses Ergebnis im Routinebetrieb aufrecht erhalten zu können. Vor diesem Hintergrund ist selbst das Stitching-Ergebnis für Avo28-S8 eine zuverlässige Angabe für die eigentliche Form der Kugel.

Insgesamt zeigt der Vergleich der Stitching-Ergebnisse mit den Resultaten der Rundheitsmessungen, dass es mit dem Kugelinterferometer der PTB möglich ist, nicht nur die Durchmesser einer Kugel mit Formabweichungen absolut zu bestimmen. Stattdessen kann aus den Messungen zusätzlich die reale Kugelform berührungslos, lateral hoch aufgelöst und mit einer Genauigkeit im Bereich weniger Nanometer ermittelt werden, so dass sich insgesamt die absolute Kugelgeometrie ergibt, und ohne dass wie bei Griesmann *et. al.* Diskrepanzen auftreten, die größer als die eigentlichen Formabweichungen sind.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Das Kugelinterferometer der PTB wurde ursprünglich dafür konzipiert, die Volumenbestimmung von sphärischen Maßverkörperungen – insbesondere der Kugeln des Avogadro-Projekts – über präzise Durchmessermessungen im Bereich von einem Nanometer oder weniger zu ermöglichen. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein Verfahren implementiert und vorgestellt, mit dem der eigentliche Verwendungszweck des Kugelinterferometers erweitert werden kann. An Stelle der üblicherweise aus der Auswertung erhaltenen Durchmessertopografie, die punktsymmetrisch zum Kugelmittelpunkt ist und somit keine eindeutige Seitenzuordnung der topografischen Merkmale der Kugeloberfläche zulässt, liefert die beschriebene Stitching-Methode erstmals die wirkliche, absolute Form der Kugel auf einige Nanometer genau.

Um eine Vergleichsbasis für die Stitching-Ergebnisse zu haben, gibt Kapitel 3 einen Überblick über die ursprünglich verwendete Art der Datenauswertung zur Durchmesserbestimmung. Gleichzeitig enthält es grundlegende Zusammenhänge, die auch für das Stitching-Verfahren benötigt werden. Dies betrifft insbesondere die Herleitung der analytischen Ausdrücke für die Koordinatenzuordnung der Messwerte, die Einführung der Kugelflächenfunktionen für die Darstellung der Kugelform und die Gittereinteilung der Kugeloberfläche. In Kapitel 4 zeigt eine detaillierte Analyse der Messgenauigkeit, dass die Ergebnisse mit einer Präzision im Nanometerbereich zu erwarten sind, da sowohl die Messunsicherheit der Durchmesserbestimmung als auch die Reproduzierbarkeit in der Größenordnung von 1 nm liegen. Auf Grundlage dieser Vorinformationen wird in Kapitel 5 schließlich das Stitching-Verfahren vorgestellt und hinsichtlich der Modellerweiterungen und -modifikationen im Vergleich zu früheren Arbeiten erläutert.

Durch Berücksichtigung des zweiseitigen Messprinzips des Kugelinterferometers der PTB kann mit dem Stitching-Ansatz erstmals nicht nur eine relative Formabweichung des Kugelprüflings, sondern bei hinreichend genau bekanntem Grundradius die absolute Form höchstgenau ermittelt werden. An Hand von simulierten Datensätzen wurde die Funktionalität des Algorithmus geprüft und bestätigt, um ihn anschließend auf reale Messdatensätze anzuwenden. Die Resultate wurden mit den Durchmessertopografien und zusätzlich mit den unabhängigen Ergebnissen von Rundheitsmessungen quantitativ verglichen. Dabei zeigte sich, dass in der Differenzdarstellung die Messspuren der Rundheitsmessungen

aufgelöst und eindeutig zu identifizieren sind. Gleichzeitig deckt bereits der Unsicherheitsbereich der Rundheitsmessungen von $\pm 4\text{ nm}$ den Großteil der auftretenden Differenzen ab. Unter zusätzlicher Berücksichtigung der noch geringeren Messunsicherheit der absoluten Durchmesserbestimmung kann von einer Unsicherheit der Stitching-Ergebnisse in einer vergleichbaren Größenordnung ausgegangen werden.

Damit konnte gezeigt werden, dass es mit dem Kugelinterferometer der PTB in Verbindung mit dem vorgestellten Stitching-Verfahren möglich ist, die absolute Form eines sphärischen Messobjekts auf wenige Nanometer genau und berührungslos mit einer höheren lateralen Auflösung als bei taktilen Rundheitsmessungen üblich anzugeben. Dies ist nicht nur im Rahmen des Avogadro-Projekts hilfreich, um geeignete Stellen für punktweise Vergleichsmessungen der Durchmesser zu identifizieren, sondern allgemein in allen Fällen, in denen eine präzise richtungsabhängige Radiusinformation von Interesse ist. Im Beispiel der Antast- oder Referenzkugeln von Koordinatenmessgeräten kann die genaue Kenntnis der Kugelgeometrie in Zukunft zu einer Verbesserung der Messgenauigkeit beitragen.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Eine der im Durchmesser rund 94 mm großen Siliziumkugeln des Avogadro-Projekts	3
2.1	Schema für eine Fizeau-Anordnung	5
2.2	Exemplarisches Intensitätsprofil einer Vielstrahlinterferenz in Reflexion .	6
2.3	Schema zum Prinzip der Durchmesserbestimmung mit einem sphärischen Fizeau-Interferometer	9
3.1	Schema des Kugelinterferometeraufbaus.	11
3.2	Schema der Laserstabilisierung	15
3.3	(a) Exemplarische Sequenz von fünf Interferogrammen und (b) Beispiel für die Intensitätsmodulation eines Kamerapixels	17
3.4	Exemplarisches Schema zum Messablauf mit 30°-Drehungsschritten, das nach vollständiger Durchführung 31 zweiseitige Einzelmessungen umfasst.	18
3.5	Skizze zur Umrechnung der Messkoordinaten	22
3.6	Gitter aus Längen- und Breitengraden	29
3.7	Die zwei größten platonischen Körper (a) Dodekaeder und (b) Ikosaeder.	29
3.8	Schema zur Veranschaulichung der Unterteilung einer Dreiecksfläche in kleinere Dreiecksegmente	30
3.9	Exemplarische Punktverteilungen auf der Oberfläche einer Kugel	31
3.10	Vergrößerte Darstellung von Abbildung 3.9(f)	31
3.11	Exemplarische Auswahl der den Vertizes zugeordneten Flächen auf der Oberfläche der Einheitskugel betragsmäßig aufsteigend sortiert	32
3.12	Darstellung der Differenz der Durchmessertopografien von Kugel <i>Avo1</i> , die nach den beiden Auswertungsmethoden Gittersortierung und Fit mit Kugelflächenfunktionen ($N_{SH} = 250$) entstanden sind.	34
3.13	Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel <i>Avo1</i> und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion.	35

3.14	Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel <i>Avo2</i> und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion.	35
3.15	Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel <i>Avo3</i> und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion.	35
3.16	Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel <i>Si3</i> und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion.	36
3.17	Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel <i>Avo28-S5</i> und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion.	36
3.18	Darstellung der Durchmessertopografie von Kugel <i>Avo28-S8</i> und der zu Grunde liegenden Messwertverteilung (logarithmisch skaliert) in Mollweide-Projektion.	36
4.1	Ergebnisse zur Reproduzierbarkeit	41
4.2	Differenz zweier Messungen eines Topografiesegments von <i>Avo28-S8</i> mit einem Zeitabstand von (a) einem Jahr (P-V: 3,84 nm) und (b) zwei Stunden (P-V: 1,83 nm).	42
4.3	Akkumulierte Vertexpositionen von einem Gitter mit (a) 92 Vertizes und (b) 252 Vertizes nach 100 zufälligen Rotationen.	43
4.4	Mittlere Durchmesser von 10000 zufälligen Rotationen eines Gitters mit (a) 12 Vertizes und (b) 252 Vertizes.	44
4.5	Differenz zwischen dem minimalen und dem maximalen auftretenden Durchmesserwert $\Delta(\max, \min)$ innerhalb von 10000 Rotationsdurchläufen	45
4.6	Mit Kugelflächenfunktionen simulierte Topografie aus 120 Parametern $k_{\ell m}$ für unterschiedliche η_e	46
4.7	Differenz zwischen dem minimalen und dem maximalen auftretenden Durchmesserwert $\Delta(\max, \min)$ innerhalb von 5000 Rotationsdurchläufen	48
4.8	Position der ausgewählten Stellen für die Messungen neben der Markierung auf der Kugel.	49
4.9	Schema der Zielpositionen von der ausgewählten Stelle auf der Kugel innerhalb des Sichtfelds der Objektive.	49
4.10	Exemplarische Topografieausschnitte von $17\text{px} \times 17\text{px}$ im Bereich der ausgewählten Stelle. Die Farbskala umfasst rund 10 nm.	50

4.11 Positionen der ausgewählten Messposition im Sichtfeld chronologisch durchnummeriert.	51
4.12 Positionen der Winkelmarkierung als ausgewählte Messposition im Sichtfeld chronologisch durchnummeriert.	52
4.13 Formabweichungen der Objektivreferenzflächen, die sich durch Mittelung von rund 20 Einzelmessungen ergeben.	52
5.1 Illustration zur Idee des Stitching-Verfahrens	55
5.2 Im Stitching-Modell enthaltene Effekte: (a) Konzentrischer Idealfall, (b) Formabweichung der Objektiv-Referenzflächen, (c) Verschiebung/„Kippung“ der Kugel und (d) Verschiebung/Kippung der Objektive .	55
5.3 Beispiel für die Besetzungsstruktur der Modellmatrix mit einem verzerrten Zeilen-zu-Spalten-Verhältnis von etwa 500:1.	59
5.4 Beispiel für die Besetzungsstruktur der Modellmatrix mit einem verzerrten Zeilen-zu-Spalten-Verhältnis von etwa 200:1.	61
5.5 Simulierte Radiustopografie bestehend aus 500 Kugelflächenfunktionen und das zugehörige Amplitudenspektrum.	65
5.6 Simulierte Objektivtopografien aus jeweils 50 Zernike-Polynomen. Die Höhenvariationen umfassen rund (a) 63 nm und (b) 33 nm.	66
5.7 Grafische Darstellung des Lösungsvektors für die Idealrekonstruktion der simulierten Topografie.	67
5.8 Für die simulierten Messungen generierte Abdeckungsschemata mit unterschiedlichem Überlapp	69
5.9 Abhängigkeit der Bewertungskriterien χ , σ_m , $\text{RMS}_{\text{coeff}}$ und RMS_{topo} von der Größe der überlappenden Bereiche benachbarter Einzelmessungen. . .	70
5.10 Abhängigkeit der Bewertungskriterien χ , σ_m , $\text{RMS}_{\text{coeff}}$ und RMS_{topo} von der Größe des Sichtfeldradius.	70
5.11 Die Messstrategie aus Abbildung 5.8(b) mit einem auf 35 px eingeschränkten Sichtfeldradius.	71
5.12 Abhängigkeit der Bewertungskriterien χ , σ_m , $\text{RMS}_{\text{coeff}}$ und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Kugelflächenfunktionen N_{SH}	71
5.13 Beispielergebnis für eine Überanpassung der simulierten Topografie bei $N_{\text{SH}} = 600$	73
5.14 Abhängigkeit der Bewertungskriterien χ , σ_m , $\text{RMS}_{\text{coeff}}$ und RMS_{topo} von dem bei der Erzeugung der simulierten Topografie verwendeten Skalierungsfaktor η_{err}	74

5.15	Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion der Objektiv-Referenzflächen einbezogenen Anzahl von Zernike-Polynome N_Z	75
5.16	Messwertverteilungen der gemessenen Kugeldatensätze, die sich bei Be- schränkung auf die Messungen mit Interferometerarm 1 ergeben.	76
5.17	Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Kugelflächenfunktionen N_{SH} bei $N_Z = 60$ für <i>Avo1</i>	77
5.18	Grafische Darstellung der Unsicherheiten für die Koeffizienten der Kugel- flächenfunktionen aus einer Rekonstruktion auf Grundlage der Messdaten von Kugel <i>Avo1</i>	77
5.19	Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Kugelflächenfunktionen N_{SH} bei $N_Z = 60$ für <i>Avo28-S5</i>	78
5.20	Beispiel für eine fehlgeschlagene Rekonstruktion auf Grundlage der Messdaten von Kugel <i>Avo28-S5</i> mit Interferometerarm 1.	78
5.21	Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Kugelflächenfunktionen N_{SH} bei $N_Z = 60$ für <i>Avo28-S8</i>	79
5.22	Rekonstruierte Radiustopografien auf Grundlage der Messdaten von Ku- gel <i>Avo28-S8</i> mit Interferometerarm 1 und Interferometerarm 2 separiert.	79
5.23	Rekonstruierte Radiustopografien auf Grundlage der Messdaten von Ku- gel <i>Avo28-S5</i> mit Interferometerarm 1 und Interferometerarm 2 separiert.	80
5.24	Darstellung der mit $N_{\text{SH}} = 650$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopo- grafie von Kugel <i>Avo1</i>	81
5.25	Darstellung der mit $N_{\text{SH}} = 650$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopo- grafie von Kugel <i>Avo2</i>	81
5.26	Darstellung der mit $N_{\text{SH}} = 650$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopo- grafie von Kugel <i>Avo3</i>	82
5.27	Darstellung der mit $N_{\text{SH}} = 800$ und $N_Z = 60$ rekonstruierten Radiustopo- grafie von Kugel <i>Si3</i>	82
5.28	Darstellung der mit $N_{\text{SH}} = 700$ und $N_Z = 60$ rekonstruierten Radiustopo- grafie von Kugel <i>Avo28-S5</i>	83
5.29	Darstellung der mit $N_{\text{SH}} = 700$ und $N_Z = 60$ rekonstruierten Radiustopo- grafie von Kugel <i>Avo28-S8</i>	83
5.30	Grafische Darstellung des Lösungsvektorteils der Korrekturkoeffizienten für die Rekonstruktion der Messdaten von Kugel <i>Avo28-S8</i>	85

5.31 Grafische Darstellung des Lösungsvektorteils der Koeffizienten der Objektiv-Referenzflächen für die Rekonstruktion der Messdaten von Kugel <i>Avo28-S8</i>	86
5.32 Grafische Darstellung des Lösungsvektorteils der Koeffizienten der Kugeltopografie für die Rekonstruktion der Messdaten von Kugel <i>Avo28-S8</i>	86
5.33 Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Rekonstruktionspunkten N_r bei $N_Z = 50$ für <i>Si3</i>	88
5.34 Rekonstruierte Radiustopografien auf Grundlage der Messdaten von Kugel <i>Si3</i> mit Interferometerarm 1 und Interferometerarm 2 separiert.	89
5.35 Grafische Darstellung des Lösungsvektorteils der Koeffizienten der Kugeltopografie für die Rekonstruktion der Messdaten von Kugel <i>Si3</i>	89
5.36 Grafische Darstellung des Lösungsvektorteils der Koeffizienten der Kugeltopografie für die Rekonstruktion der Messdaten von Kugel <i>Si3</i>	90
5.37 Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Rekonstruktionspunkten N_r bei $N_Z = 50$ für <i>Avo28-S5</i>	91
5.38 Abhängigkeit der Bewertungskriterien σ_m und RMS_{topo} von der in die Rekonstruktion einbezogenen Anzahl von Rekonstruktionspunkten N_r bei $N_Z = 50$ für <i>Avo28-S8</i>	91
5.39 Darstellung der mit $N_r = 812$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel <i>Avo1</i>	93
5.40 Darstellung der mit $N_r = 812$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel <i>Avo2</i>	93
5.41 Darstellung der mit $N_r = 812$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel <i>Avo3</i>	93
5.42 Darstellung der mit $N_r = 3612$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel <i>Si3</i>	94
5.43 Darstellung der mit $N_r = 2252$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel <i>Avo28-S5</i>	94
5.44 Darstellung der mit $N_r = 1692$ und $N_Z = 50$ rekonstruierten Radiustopografie von Kugel <i>Avo28-S8</i>	94
5.45 Schema zum Ablauf der Rundheitsmessungen	96
5.46 Ergebnisse der Rundheitsmessungen an den Kugeln <i>Avo28-S5</i> und <i>Avo28-S8</i>	98

5.47	Nach Gleichung (5.28) berechnete Differenzen an den 648 Messpositionen der Rundheitsmessungen an der Kugel <i>Avo28-S5</i> als Topografiedarstellung und als Histogramm.	98
5.48	Nach Gleichung (5.28) berechnete Differenzen an den 648 Messpositionen der Rundheitsmessungen an der Kugel <i>Avo28-S8</i> als Topografiedarstellung und als Histogramm.	99
A.1	Skizze zur Nebenrechnung	127

Tabellenverzeichnis

3.1	Abhängigkeit des Parameters κ von den Vorzeichen von Zähler und Nenner in Gleichung (3.26).	25
3.2	Mittlere Radien $d_{\text{Mittel}}/2$, minimale und maximale Werte $d_{\text{Min}}/2$ bzw. $d_{\text{Max}}/2$ und die entsprechenden P-V-Werte der in den Abbildungen 3.13 bis 3.18 dargestellten Radiustopografien.	33
4.1	Exemplarisches Unsicherheitsbudget	39
5.1	Mittlere Radien r_{Mittel} , minimale und maximale Werte r_{Min} bzw. r_{Max} und die entsprechenden P-V-Werte der in den Abbildungen 5.24 bis 5.29 dargestellten Radiustopografien. Zum Vergleich sind in Klammern zusätzlich die P-V-Werte der Durchmessertopografien aus Tabelle 3.2 angegeben. . .	84
5.2	Minimale und maximale Radiusabweichung Δr_{Min} bzw. Δr_{Max} , der entsprechende P-V-Wert und globale RMS-Abweichung RMS_{topo} zu den in den Abbildungen 5.24 bis 5.29 gezeigten Differenzdarstellungen.	84
5.3	Mittlere Radien r_{Mittel} , minimale und maximale Werte r_{Min} bzw. r_{Max} und die entsprechenden P-V-Werte der in den Abbildungen 5.39 bis 5.44 dargestellten Radiustopografien. Zum Vergleich sind in Klammern zusätzlich die P-V-Werte der Durchmessertopografien aus Tabelle 3.2 angegeben. . .	92
5.4	Minimale und maximale Radiusabweichung Δr_{Min} bzw. Δr_{Max} , der entsprechende P-V-Wert und globale RMS-Abweichung RMS_{topo} zu den in den Abbildungen 5.39 bis 5.44 gezeigten Differenzdarstellungen.	95

Literaturverzeichnis

- [1] GIRARD, G.: The Third Periodic Verification of National Prototypes of the Kilogram (1988-1992). In: *Metrologia* 31 (1994), S. 317–336
- [2] BECKER, P. ; FRIEDRICH, H. ; FUJII, K. ; GIARDINI, W. ; MANA, G. ; PICARD, A. ; POHL, H.-J. ; RIEMANN, H. ; VALKIERS, S.: The Avogadro constant determination via enriched silicon-28. In: *Meas. Sci. Technol.* 20 (2009), S. 1–20. <http://dx.doi.org/10.1088/0957-0233/20/9/092002>. – DOI 10.1088/0957-0233/20/9/092002
- [3] FUJII, K. ; WASEDA, A. ; KURAMOTO, N. ; MIZUSHIMA, S. ; BECKER, P. ; BETTIN, H. ; NICOLAUS, A. ; KUETGENS, U. ; VALKIERS, S. ; TAYLOR, P. ; BIÈVRE, P. de ; MANA, G. ; MASSA, E. ; MATYI, R. ; E. G. KESSLER, Jr. ; HANKE, M.: Present State of the Avogadro Constant Determination From Silicon Crystals With Natural Isotopic Compositions. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 54 (2005), April, Nr. 2, S. 854–859
- [4] BASILE, G. ; BECKER, P. ; BERGAMIN, A. ; BETTIN, H. ; CAVAGNERO, G. ; DE BIÈVRE, P. ; KÜTGENS, U. ; MANA, G. ; MOSCA, M. ; PAJOT, B. ; PANCIERA, R. ; PASIN, W. ; PETTORRUSO, S. ; PEUTO, A. ; SACCONI, A. ; STÜMPPEL, J. ; VALKIERS, S. ; VITTONE, E. ; ZOSI, G.: A New Determination of N_A . In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 44 (1995), April, Nr. 2, S. 538–541
- [5] BECKER, P. ; BIÈVRE, P. D. ; FUJII, K. ; GLAESER, M. ; INGLIS, B. ; LUEBBIG, H. ; MANA, G.: Considerations on future redefinitions of the kilogram, the mole and of other units. In: *Metrologia* 44 (2007), S. 1–14. <http://dx.doi.org/10.1088/0026-1394/44/1/001>. – DOI 10.1088/0026-1394/44/1/001
- [6] BECKER, P. ; BETTIN, H. ; DANZEBRINK, H.-U. ; GLÄSER, M. ; KUETGENS, U. ; NICOLAUS, A. ; SCHIEL, D. ; BIÈVRE, P. de ; VALKIERS, S. ; TAYLOR, P.: Determination of the Avogadro constant via the silicon route. In: *Metrologia* 40 (2003), September, S. 271–287

- [7] BECKER, P. ; CAVAGNERO, G. ; KUETGENS, U. ; MANA, G. ; MASSA, E.: Confirmation of the INRiM and PTB Determinations of the Si Lattice Parameter. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 56 (2007), S. 230–234
- [8] BORYS, Michael ; GLÄSER, Michael ; MECKE, Michael: Mass determination of silicon spheres used for the Avogadro project. In: *Measurement* 40 (2007), S. 785–790
- [9] PICARD, A. ; BIGNELL, N. ; BORYS, M. ; DOWNES, S. ; MIZUSHIMA, S.: Mass comparison of the 1 kg silicon sphere AVO#3 traceable to the International Prototype K. In: *Metrologia* 46 (2009), S. 1–10. <http://dx.doi.org/10.1088/0026-1394/46/1/001>. – DOI 10.1088/0026-1394/46/1/001
- [10] BIÈVRE, Paul D. ; VALKIERS, Staf ; KESSEL, Rüdiger ; TAYLOR, Philip D. P. ; BECKER, Peter ; BETTIN, Horst ; PEUTO, Anna ; PETTORRUSO, Savino ; FUJII, Kenichi ; WASEDA, Atsushi ; TANAKA, Mitsuru ; DESLATTES, R. D. ; PEISER, H. S. ; KENNY, M. J.: Reassessment of the Molar Volume of Silicon and of the Avogadro Constant. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 50 (2001), Nr. 2, S. 593–597
- [11] BUSCH, Ingo ; DANZEBRINK, Hans-Ulrich ; KRUMREY, Michael ; BORYS, Michael ; BETTIN, Horst: Oxide Layer Mass Determination at the Silicon Sphere of the Avogadro Project. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 58 (2009), Nr. 4, S. 891–896
- [12] BETTIN, Horst ; TOTH, Hans: Solid density determination by the pressure-of-flotation method. In: *Meas. Sci. Technol.* 17 (2006), S. 2567–2573. <http://dx.doi.org/10.1088/0957-0233/17/10/006>. – DOI 10.1088/0957-0233/17/10/006
- [13] FUJII, Kenichi ; WASEDA, Atsushi ; TANAKA, Mitsuru: Density Measurements of Silicon Crystals by Hydrostatic Weighing. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 50 (2001), Nr. 2, S. 616–621
- [14] WASEDA, Atsushi ; FUJII, Kenichi: Density Comparison Measurement of Silicon by Pressure of Flotation Method. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 50 (2001), Nr. 2, S. 604–607
- [15] LEISTNER, A. J. ; GIARDINI, W. J.: Fabrication and Sphericity Measurements of Single-crystal Silicon Spheres. In: *Metrologia* 31 (1994), S. 231–243

- [16] KURAMOTO, Naoki ; FUJII, Kenichi: Improvement in the Volume Determination for Si Spheres with an Optical Interferometer. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 58 (2009), Nr. 4, S. 915–918
- [17] KURAMOTO, N. ; FUJII, K.: Volume determination of a silicon sphere using an improved interferometer with optical frequency tuning. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 54 (2005), April, Nr. 2, S. 868–871
- [18] KURAMOTO, Naoki ; FUJII, Ken-Ichi: Interferometric Determination of the Diameter of a Silicon Sphere Using a Direct Optical Frequency Tuning System. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 52 (2003), April, Nr. 2, S. 631–635
- [19] GIARDINI, Walter ; MANSON, Peter ; WOUTERS, Michael ; WARRINGTON, Bruce ; WARD, Brad ; BIGNELL, Noel ; WALSH, Chris ; JAATINEN, Esa ; KENNY, Michael: Density of a Single-Crystal Natural Silicon Sphere. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 58 (2009), Nr. 4, S. 908–914
- [20] KENNY, Michael J. ; LEISTNER, Achim J. ; WALSH, Christopher J. ; FEN, Kitty ; GIARDINI, Walter J. ; WIELUNSKI, Leszek S. ; NETTERFIELD, Roger P. ; WARD, Bradley R.: Precision Determination of the Density of a Single Crystal Silicon Sphere and Evaluation of the Avogadro Constant. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 50 (2001), Nr. 2, S. 587–592
- [21] SAUNDERS (SR.), J. B.: Ball and Cylinder Interferometer. In: *J. Res. Nat. Bur. Stand.* 76C (1972), Nr. 1 & 2, S. 11–20
- [22] NICOLAUS, R. A. ; BÖNSCH, G.: A Novel Interferometer for Dimensional Measurement of a Silicon Sphere. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 46 (1997), April, Nr. 2, S. 563–565
- [23] NICOLAUS, R. A. ; BÖNSCH, G.: Doppelseitige Fizeau-Interferometer mit Phasenverschiebeauswertung für dimensionelle Messungen. In: *Technisches Messen* 65 (1998), März, S. 83–90
- [24] NEUMANN, Hans-Joachim ; METTNER, Michael (Hrsg.): *Präzisionsmesstechnik in der Fertigung mit Koordinatenmessgeräten: Entwicklung, Normung, Grundlagen, Messunsicherheit, Anwendungserfahrungen, Auswahlkriterien, Ausbildung.* Expert-Verlag, 2004

- [25] BEUCK, Wolfgang ; PFEIFER, Tilo (Hrsg.): *Koordinatenmesstechnik für die Qualitätssicherung – Grundlagen - Technologien - Anwendungen - Erfahrungen*. VDI Verlag, 1992
- [26] KNIEL, Karin: *Ein Beitrag zur Entwicklung eines laserinterferometrischen Trackingsystems für die Genauigkeitssteigerung in der Koordinatenmesstechnik*, Technische Universität Ilmenau, Dissertation, April 2007
- [27] BURKE, J. ; OREB, B.: The last Word on Three-Flat Calibration – are we there yet? In: OSTEN, W. (Hrsg.) ; KUJAWINSKA, M. (Hrsg.): *FRINGE '09 Proceedings*, 2009, S. 309–317
- [28] AIRY, G. B.: *Phil. Mag.* 2, p. 20. 1833. – also *Ann. Phys. und Chem.* 41 (1837) p. 512
- [29] BORN, M. ; WOLF, E.: *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference, and Diffraction of Light*. 6th ed. New York: Pergamon Press, 1989
- [30] BÖNSCH, G. ; BÖHME, H.: Phase-determination of Fizeau interferences by phase-shifting interferometry. In: *Optik* 82 (1989), Nr. 4, S. 161–164
- [31] CREATH, K.: Comparison of phase-measurement algorithms. In: CREATH, K. (Hrsg.): *Surface Characterization and Testing. SPIE Proceedings* Bd. 680, 1986, S. 19–28
- [32] NICOLAUS, R. A.: Evaluation of Fizeau interferences: a comparison of phase-stepping-algorithms. In: LANZL, F. (Hrsg.) ; PREUSS, H.-J. (Hrsg.) ; G., Weigelt (Hrsg.): *Optics in complex systems. SPIE Proceedings* Bd. 1319, 1990, S. 237–238
- [33] HARIHARAN, P.: Digital phase-stepping interferometry: effects of multiply reflected beams. In: *Applied Optics* 26 (1987), Juli, Nr. 13, S. 2506–2507
- [34] NICOLAUS, Ralph A.: *Auswertung von Fizeau-Interferenzen mit Hilfe der Phasenverschiebungsinterferometrie*, Technische Universität Braunschweig, Dissertation, Oktober 1993
- [35] NICOLAUS, R. A.: Precise method of determining systematic errors in phase-shifting interferometry on Fizeau interferences. In: *Applied Optics* 32 (1993), November, Nr. 31, S. 6380–6386

- [36] NICOLAUS, R. A. ; GECKELER, Ralf D.: Improving the Measurement of the Diameter of Si Spheres. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 56 (2007), April, Nr. 2, S. 517–522
- [37] PRESTON-THOMAS, H.: The International Temperature Scale of 1990. In: *Metrologia* 27 (1990), S. 3–10
- [38] NICOLAUS, Arnold ; SCHULZ, Michael ; WEINGÄRTNER, Ingolf: Messung ausgehnter Wellenfronten mit einem Shack-Hartmann Sensor. In: *DGaO-Proceedings*, 2004
- [39] SCHÖDEL, R. ; BÖNSCH, G.: Highest-accuracy interferometer alignment by retro-reflection scanning. In: *Applied Optics* 43 (2004), Nr. 31, S. 5738–5743
- [40] IMKENBERG, F. ; NICOLAUS, A. ; ABOU-ZEID, A.: Tunable 633 nm diode lasers and application for phase stepping interferometry. In: *Proc. 1st Int. EuSPEN Conf.: Precision Engineering-Nanotechnology* Bd. 2, 1999, S. 243–246
- [41] NICOLAUS, R. A. ; BÖNSCH, G. ; KANG, C.-S.: Interferometrische Kalibrierverfahren für die Schrittweitensteuerung eines Phasenverschiebeinterferometers. In: *Technisches Messen* 67 (2000), Juli/August, S. 328–333
- [42] BUREAU INTERNATIONAL DES POIDS ET MESURES: *The International System of Units (SI)*. http://www.bipm.org/utils/common/pdf/si_brochure_8.pdf. Version: 2006. – 8th edition
- [43] QUINN, T. J.: Practical realization of the definition of the metre, including recommended radiations of other optical frequency standards (2001). In: *Metrologia* 40 (2003), 103-133. <http://www.iop.org/EJ/article/0026-1394/40/2/316/me3216.pdf>
- [44] *The NIST Reference on Constants, Units, and Uncertainty (August 2009)*. <http://physics.nist.gov/cuu/>
- [45] INDIZEN OPTICAL TECHNOLOGIES: *XtremeFringe®*. <http://www.iot.es/XtremeFringe/>
- [46] QUIROGA, J. A. ; CRESPO, Daniel ; GOMEZ-PEDRERO, J. A.: *XtremeFringe®*: state-of-the-art software for automatic processing of fringe patterns. In: OSTEN, Wolfgang (Hrsg.) ; GORECKI, Christophe (Hrsg.) ; NOVAK, Erik L. (Hrsg.): *Optical Measurement Systems for Industrial Inspection V* Bd. 6616, 2007 (Proc. of SPIE), 66163Y

- [47] FLYNN, Thomas J.: Two-dimensional phase unwrapping with minimum weighted discontinuity. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 14 (1997), Oktober, Nr. 10, S. 2692–2701
- [48] *Kapitel The Three-Dimensional Light Distribution Near Focus.* In: BORN, M. ; WOLF, E.: *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference, and Diffraction of Light.* 6th ed. New York: Pergamon Press, 1989, S. 435–449
- [49] NICOLAUS, R. A. ; BÖNSCH, G.: Absolute volume determination of a silicon sphere with the spherical interferometer of PTB. In: *Metrologia* 42 (2005), Januar, S. 24–31
- [50] SCHÖDEL, R. ; BÖNSCH, G.: Precise interferometric measurements at single crystal silicon yielding thermal expansion coefficients from 12 °C to 28 °C and compressibility. In: DECKER, Jennifer E. (Hrsg.) ; BROWN, Nicholas (Hrsg.): *Proc. SPIE: Recent Development in Traceable Dimensional Measurements* Bd. 4401, 2001, S. 54–62
- [51] ZHERNOV, A. P.: Lattice constant and coefficient of linear thermal expansion of the silicon crystal. Influence of isotopic composition. In: *Low Temp. Phys.* 26 (2000), December, Nr. 12, S. 908–915
- [52] BARTL, G. ; NICOLAUS, A. ; KESSLER, E. ; SCHÖDEL, R. ; BECKER, P.: The coefficient of thermal expansion of highly enriched ^{28}Si . In: *Metrologia* 46 (2009), S. 416–422. <http://dx.doi.org/10.1088/0026-1394/46/5/005>. – DOI 10.1088/0026-1394/46/5/005
- [53] BRUCE, C. F.: Obliquity Effects in Interferometry. In: *Optica Acta* 4 (1957), S. 127–135
- [54] NICOLAUS, R. A. ; BÖNSCH, G.: Aperture correction for a sphere interferometer. In: *Metrologia* 46 (2009), S. 668–673. <http://dx.doi.org/10.1088/0026-1394/46/6/009>. – DOI 10.1088/0026-1394/46/6/009
- [55] JOHNSON, Daniel P.: Geometrical Considerations in the Measurement of the Volume of an Approximate Sphere. In: *J. Res. Nat. Bur. Stand.* 78A (1974), Nr. 1, S. 41–48
- [56] MANA, G.: Volume of Quasi-spherical Solid Density Standards. In: *Metrologia* 31 (1994), S. 289–300

- [57] COHEN-TANNOUDJI, C. ; DIU, B. ; LALOË, F.: *Quantum Mechanics – Part 1*. Wiley, 1977
- [58] ABRAMOWITZ, Milton ; STEGUN, Irene A.: *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 9th Dover printing, 10th GPO printing. New York : Dover, 1964 <http://www.math.sfu.ca/~cbm/aands/>
- [59] *Kapitel 5*. The joint treatment of several measurands. In: LIRA, Ignacio: *Evaluating the measurement uncertainty: fundamentals and practical guidance*. IOP Publishing Ltd, 2002, S. 119–165
- [60] SAKUMA, Akihiro ; FUJII, Ken-Ichi ; TANAKA, Mitsuru: Experimental determination of the volume of a crystalline silicon sphere using spherical harmonics. In: *Measurement Science and Technology* 5 (1994), Oktober, Nr. 10, S. 1233–1238
- [61] NICOLAUS, R. A. ; FUJII, K.: Primary calibration of the volume of silicon spheres. In: *Meas. Sci. Technol.* 17 (2006), S. 2527–2539
- [62] PONTI, Alessandro: Simulation of Magnetic Resonance Static Powder Lineshapes: A Quantitative Assessment of Spherical Codes. In: *Journal of Magnetic Resonance* 138 (1999), S. 288–297
- [63] RANDALL, David A. ; RINGLER, Todd D. ; HEIKES, Ross P. ; JONES, Phil ; BAUMGARDNER, John: Climate modeling with spherical geodesic grids. In: *Computing in Science & Engineering* 4 (2002), September/Oktober, Nr. 5, S. 32–41
- [64] TEGMARK, Max: An icosahedron-based method for pixelizing the celestial sphere. In: *ApJ Letters* 470 (1996), Oktober, L81-L84. <http://www.citebase.org/abstract?id=oai:arXiv.org:astro-ph/9610094>
- [65] *Kapitel* Voronoi diagrams: The Post office problem Ch. 7. In: BERG, M. de ; KREVELD, M. van ; OVERMANS, M. ; SCHWARZKOPF, O.: *Computational geometry: Algorithms and applications 2nd rev. ed.* Berlin: Springer-Verlag, 2000, S. 147–163
- [66] NICOLAUS, R. A. ; ELSTER, Clemens: Diameter Determination of Avogadro Spheres #1 and #2. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 54 (2005), April, Nr. 2, S. 872–876
- [67] ITT VISUAL INFORMATION SOLUTIONS: *IDL (Interactive Data Language)*. <http://www.itervis.com/IDL>

- [68] SNYDER, John P.: Map Projections: A Working Manual / Geological Survey (U.S.). Version: 1987. <http://pubs.er.usgs.gov/usgspubs/pp/pp1395>. 1987 (1395). – Forschungsbericht
- [69] BECKER, P ; SCHIEL, D ; POHL, H-J ; KALITEEVSKI, A K. ; GODISOV, O N. ; CHURBANOV, M F. ; DEVYATYKH, G G. ; GUSEV, A V. ; BULANOV, A D. ; ADAMCHIK, S A. ; GAVVA, V A. ; KOVALEV, I D. ; ABROSIMOV, N V. ; HALLMANN-SEIFFERT, B ; RIEMANN, H ; VALKIERS, S ; TAYLOR, P ; BIÈVRE, P D. ; DIANOV, E M.: Large-scale production of highly enriched ^{28}Si for the precise determination of the Avogadro constant. In: *Meas. Sci. Technol.* 17 (2006), Juni, S. 1854–1860
- [70] ISO: *Guide to the expression of uncertainty in measurement*. First edition, reprinted 1995. International organization for standardization, Genève, Switzerland, 1993
- [71] JOINT COMMITTEE FOR GUIDES IN METROLOGY: *Evaluation of measurement data – Guide to the expression of uncertainty in measurement*. <http://www.bipm.org/en/publications/guides/gum.html>. Version: First edition, September 2008
- [72] METRODATA GMBH – DATENVERARBEITUNG FÜR MESSTECHNIK UND QUALITÄTSSICHERUNG: *GUM Workbench*. <http://www.metrodata.de/>
- [73] BETTIN, H.: *persönliche Mitteilungen*
- [74] *Kapitel Interferometer Optical Errors*. In: MALACARA, Daniel: *Optical Shop Testing*. 3rd Edition. John Wiley & Sons, Inc., 2007 (Pure and Applied Optics), S. 611–612
- [75] BARTL, G. ; NICOLAUS, A.: Influence of the distribution of measuring points on the mean diameter determination of the Avogadro project's silicon spheres. In: *Meas. Sci. Technol.* 20 (2009), S. 065104 (6pp). <http://dx.doi.org/10.1088/0957-0233/20/6/065104>. – DOI 10.1088/0957-0233/20/6/065104
- [76] BARTL, G. ; NICOLAUS, R. A.: Investigations on Diameter Measurements of the Avogadro Silicon Sphere Dependent on the Position in the Field of View of the Interferometer Optics. In: *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 58 (2009), April, Nr. 4, S. 919–923

- [77] NICOLAUS, R. A. ; BARTL, Guido: Influence of the optical quality of the interferometer optics on the diameter measurement of the Avogadro silicon sphere. In: *Conf. Precision Electromagn. Meas. Dig.*, 2008, S. 412–413
- [78] GRIESMANN, Ulf ; WANG, Quandou ; SOONS, Johannes ; CARAKOS, Remi: A Simple Ball Averager for Reference Sphere Calibrations. In: STAHL, H. P. (Hrsg.): *Optical Manufacturing and Testing VI* Bd. 5869, 2005 (Proc. SPIE), 189-196
- [79] ELSSNER, K.-E. ; GRZANNA, J. ; SCHULZ, G.: Interferentielle Absolutprüfung von Sphärizitätsnormalen. In: *Journal of Modern Optics* 27 (1980), Nr. 4, S. 563–580. <http://dx.doi.org/10.1080/713820266>. – DOI 10.1080/713820266
- [80] SELBERG, Lars A.: Radius measurement by interferometry. In: *Optical Engineering* 31 (1992), September, Nr. 9, S. 1961–1966
- [81] FLEIG, J. ; DUMAS, P. ; MURPHY, P. E. ; FORBES, G. W.: An automated subaperture stitching interferometer workstation for spherical and aspherical surfaces. In: *Proc. SPIE* 5188 (2003), November, S. 296–307
- [82] MURPHY, Paul ; FORBES, Greg ; FLEIG, Jon ; DUMAS, Paul ; TRICARD, Marc: Stitching Interferometry: A Flexible Solution for Surface Metrology. In: *Optics & Photonics News* 14 (2003), Mai, Nr. 5, S. 38–43
- [83] SJÖDAHL, Mikael ; OREB, Bozenko F.: Stitching interferometric measurement data for inspection of large optical components. In: *Optical Engineering* 41 (2002), Februar, S. 403–408
- [84] OTSUBO, Masashi ; OKADA, Katsuyuki ; TSUJIUCHI, Jumpei: Measurement of large plane surface shapes by connecting small-aperture interferograms. In: *Optical Engineering* 33 (1994), Februar, Nr. 2, S. 608–613
- [85] GRIESMANN, U. ; SOONS, J. ; WANG, Q.: Measuring Form and Radius of Spheres with Interferometry. In: *Annals of the CIRP* 53 (2004), Nr. 1, S. 451–454
- [86] WANG, Q. ; SOONS, J. ; GRIESMANN, U.: Characterization of precision spheres with XCALIBIR. In: *Optical Fabrication and Testing (OFT)*, 2004 (OSA Technical Digest). – paper OTUD2
- [87] SCHMITZ, T. L. ; EVANS, C. J. ; DAVIES, A. ; ESTLER, W. T.: Displacement Uncertainty in Interferometric Radius Measurements. In: *Annals of the CIRP* 51 (2002), Nr. 1, S. 451–454

- [88] LAWRENCE, George N. ; DAY, R. D.: Interferometric characterization of full spheres: data reduction techniques. In: *Applied Optics* 26 (1987), November, Nr. 22, S. 4875–4882
- [89] *Kapitel* Chapter 1. In: WYANT, J. C. ; CREATH, K.: *Applied Optics and Optical Engineering Series*. Bd. Vol. XI: *Basic wavefront aberration theory for optical metrology*. Academic Press, Inc., 1992
- [90] NOLL, Robert J.: Zernike polynomials and atmospheric turbulence. In: *J. Opt. Soc. Am.* 66 (1976), März, Nr. 3, S. 207–211
- [91] SHEPARD, Donald: A two-dimensional interpolation function for irregularly-spaced data. In: *Proceedings of the 1968 23rd ACM national conference*. New York, NY, USA : ACM, 1968, S. 517–524
- [92] SAAD, Yousef: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. 1st Edition. PWS Publishing, 1996 <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html>
- [93] *Kapitel* 5. Orthogonalization and Least Squares. In: GOLUB, Gene H. ; LOAN, Charles F. V.: *Matrix computations*. 3. ed. Johns Hopkins Univ. Press, 1996, S. 206 ff.
- [94] KRYSTEK, M.: *persönliche Mitteilungen*
- [95] WEISE, Klaus ; WÖGER, Wolfgang: *Meßunsicherheit und Meßdatenauswertung*. Wiley-VCH, 1999
- [96] JOINT COMMITTEE FOR GUIDES IN METROLOGY: *Evaluation of measurement data – Supplement 1 to the 'Guide to the expression of uncertainty in measurement' – Propagation of distributions using a Monte Carlo method*. <http://www.bipm.org/en/publications/guides/gum.html>. Version: First edition, September 2008
- [97] GIARDINI, W. J. ; MANA, G.: Sphericity analysis of solid density standards. In: *Rev. Sci. Instrum.* 69 (1998), March, Nr. 3, S. 1383–1390
- [98] NELDER, J. A. ; MEAD, R.: A simplex method for function minimization. In: *Computer Journal* 7 (1965), S. 308–313
- [99] PTB ARBEITSGRUPPE 5.31 - GEOMETRISCHE NORMALE: *Übersicht der Dienstleistungen*. <http://www.ptb.de/de/org/5/53/531/>. – Stand 10/2009

-
- [100] NEUGEBAUER, M.: Uncertainty analysis for roundness measurements by the example of measurements on a glass hemisphere. In: *Meas. Sci. Technol.* 12 (2001), S. 68–76. <http://dx.doi.org/10.1088/0957-0233/12/1/309>. – DOI 10.1088/0957-0233/12/1/309
- [101] JAMES, J. D. ; SPITTLE, J. A. ; BROWN, S. G. R. ; EVANS, R. W.: A review of measurement techniques for the thermal expansion coefficient of metals and alloys at elevated temperatures. In: *Meas. Sci. Technol.* 12 (2001), S. R1–R15
- [102] SCHÖDEL, R.: Accurate extraction of thermal expansion coefficients and their uncertainties from high precision interferometric length measurements. In: DECKER, Jennifer E. (Hrsg.) ; PENG, Gow-Sheng (Hrsg.): *Recent Development in Traceable Dimensional Measurements III* Bd. 5879 Physikalisch-Technische Bundesanstalt, 2005, S. 587901–1 – 587901–11

A

Anhang

A.1 Nebenrechnung zur Frequenzdurchstimmung

Um in einem Resonator der Länge L bei gegebener Wellenlänge $\lambda = c/f$ mit der Lichtgeschwindigkeit c und der Frequenz f die Interferenzordnung von N auf $N+1$ über eine Veränderung der Laserfrequenz zu erhöhen, ist folgende Frequenzänderung Δf nötig:

$$\Delta f = f_{N+1} - f_N \quad (\text{A.1})$$

$$= \frac{c}{\lambda_{N+1}} - \frac{c}{\lambda_N} \quad (\text{A.2})$$

$$= \frac{c}{2L} \cdot (N+1) - \frac{c}{2L} \cdot N \quad (\text{A.3})$$

$$= \frac{c}{2L} \cdot \quad (\text{A.4})$$

Im Fall des Kugelinterferometers, bei dem $L \approx 150 \text{ mm}$ und $L \approx 30 \text{ mm}$ auftreten, erhält man folglich $\Delta f \approx 1 \text{ GHz}$ bzw. $\Delta f \approx 5 \text{ GHz}$. Ein Frequenzschritt zum Durchstimmen einer viertel Interferenzordnung beträgt jeweils $\Delta f/4$.

A.2 Lösungsweg zur Koordinatenumrechnung

Das für ϑ und φ zu lösende Gleichungssystem ist:

$$\left| \begin{array}{l} \sin \vartheta \cdot \cos \varphi = \frac{f_x g_z - f_z g_x}{g_z} + \frac{g_x}{g_z} \cdot \cos \vartheta \\ \sin \vartheta \cdot \sin \varphi = \frac{f_y g_z - f_z g_y}{g_z} + \frac{g_y}{g_z} \cdot \cos \vartheta \end{array} \right| \quad (\text{A.5})$$

Die erste Zeile lässt sich umformen zu

$$\cos \varphi = \pm \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} = \frac{f_x g_z - f_z g_x}{g_z} \cdot \frac{1}{\sin \vartheta} + \frac{g_x}{g_z} \cdot \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \quad (\text{A.6})$$

$$\Leftrightarrow \sin^2 \varphi = 1 - \left(\frac{f_x g_z - f_z g_x}{g_z} \cdot \frac{1}{\sin \vartheta} + \frac{g_x}{g_z} \cdot \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \right)^2 \quad (\text{A.7})$$

und dann in die zweite Zeile einsetzen. Weiteres Umformen und Ausnutzen von

$$\sin^2 \vartheta = 1 - \cos^2 \vartheta \quad \text{und} \quad g_x^2 + g_y^2 + g_z^2 = \frac{1}{r_F^2}$$

ergibt eine quadratische Gleichung für $\cos \vartheta$:

$$\cos^2 \vartheta + 2 \cdot \frac{(f_x g_z - f_z g_x) g_x + (f_y g_z - f_z g_y) g_y}{g_x^2 + g_y^2 + g_z^2} \cdot \cos \vartheta + \frac{(f_x g_z - f_z g_x)^2 + (f_y g_z - f_z g_y)^2 - g_z^2}{g_x^2 + g_y^2 + g_z^2} = 0 \quad (\text{A.8})$$

$$\Leftrightarrow \cos^2 \vartheta + 2 \cdot r_F^2 \cdot ((f_x g_z - f_z g_x) g_x + (f_y g_z - f_z g_y) g_y) \cdot \cos \vartheta + r_F^2 \cdot ((f_x g_z - f_z g_x)^2 + (f_y g_z - f_z g_y)^2 - g_z^2) = 0. \quad (\text{A.9})$$

Zur übersichtlichen Darstellung der Lösung werden die folgenden Ausdrücke definiert:

$$\begin{aligned} \zeta := f_x g_z - f_z g_x &= \left(\sin \omega_v \cos \omega_h + \frac{v_{px,x}}{r_F} \cos \omega_v \cos \omega_h - \frac{v_{px,y}}{r_F} \sin \omega_h \right) \cdot \frac{1}{r_F} \cos \omega_v \\ &\quad - \left(\cos \omega_v - \frac{v_{px,x}}{r_F} \sin \omega_v \right) \cdot \frac{1}{r_F} \sin \omega_v \cos \omega_h \\ &= \frac{v_{px,x}}{r_F^2} \cos \omega_h - \frac{v_{px,y}}{r_F^2} \cos \omega_v \sin \omega_h, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \xi := f_y g_z - f_z g_y &= \left(\sin \omega_v \sin \omega_h + \frac{v_{px,x}}{r_F} \cos \omega_v \sin \omega_h + \frac{v_{px,y}}{r_F} \cos \omega_h \right) \cdot \frac{1}{r_F} \cos \omega_v \\ &\quad - \left(\cos \omega_v - \frac{v_{px,x}}{r_F} \sin \omega_v \right) \cdot \frac{1}{r_F} \sin \omega_v \sin \omega_h \\ &= \frac{v_{px,x}}{r_F^2} \sin \omega_h + \frac{v_{px,y}}{r_F^2} \cos \omega_v \cos \omega_h, \end{aligned}$$

$$\zeta' := \zeta \cdot g_x = \frac{v_{px,x}}{r_F^3} \sin \omega_v \cos^2 \omega_h - \frac{v_{px,y}}{r_F^3} \sin \omega_v \cos \omega_v \sin \omega_h \cos \omega_h,$$

$$\xi' := \xi \cdot g_y = \frac{v_{px,x}}{r_F^3} \sin \omega_v \sin^2 \omega_h + \frac{v_{px,y}}{r_F^3} \sin \omega_v \cos \omega_v \sin \omega_h \cos \omega_h,$$

$$\zeta'' := \zeta^2 = \frac{v_{px,x}^2}{r_F^4} \cos^2 \omega_h + \frac{v_{px,y}^2}{r_F^4} \cos^2 \omega_v \sin^2 \omega_h - 2 \frac{v_{px,x} v_{px,y}}{r_F^4} \cos \omega_v \sin \omega_h \cos \omega_h,$$

$$\xi'' := \xi^2 = \frac{v_{px,x}^2}{r_F^4} \sin^2 \omega_h + \frac{v_{px,y}^2}{r_F^4} \cos^2 \omega_v \cos^2 \omega_h + 2 \frac{v_{px,x} v_{px,y}}{r_F^4} \cos \omega_v \sin \omega_h \cos \omega_h.$$

Die Lösung der quadratischen Gleichung lautet schließlich:

$$\cos \vartheta = -\frac{\zeta' + \xi'}{\frac{1}{r_F^2}} \pm \sqrt{\left(\frac{\zeta' + \xi'}{\frac{1}{r_F^2}} \right)^2 - \frac{\zeta'' + \xi'' - \frac{1}{r_F^2} \cos^2 \omega_v}{\frac{1}{r_F^2}}}. \quad (\text{A.10})$$

Durch Einsetzen und Umformen erhält man, wobei gleichzeitig das positive Vorzeichen vor der Wurzel gewählt wird:

$$\vartheta = \arccos \left(\sqrt{1 - \left(\frac{v_{px,x}^2}{r_F^2} + \frac{v_{px,y}^2}{r_F^2} \right) \cdot \cos \omega_v - \frac{v_{px,x}}{r_F} \cdot \sin \omega_v} \right). \quad (\text{A.11})$$

Einen Ausdruck für φ liefert die Division der zweiten Zeile von Gleichungssystem (A.5) durch die erste Zeile:

$$\tan \varphi = \frac{\xi + g_y \cdot \cos \vartheta}{\zeta + g_x \cdot \cos \vartheta} \quad (\text{A.12})$$

$$\Leftrightarrow \varphi = \arctan \left(\frac{\xi + g_y \cdot \cos \vartheta}{\zeta + g_x \cdot \cos \vartheta} \right). \quad (\text{A.13})$$

Mit Gleichung (A.10) wird daraus:

$$\varphi = \arctan \left(\frac{\frac{v_{px,x}}{r_F} \cos \omega_v \sin \omega_h + \frac{v_{px,y}}{r_F} \cos \omega_h + \sqrt{1 - \left(\frac{v_{px,x}^2}{r_F^2} + \frac{v_{px,y}^2}{r_F^2} \right)} \sin \omega_v \sin \omega_h}{\frac{v_{px,x}}{r_F} \cos \omega_v \cos \omega_h - \frac{v_{px,y}}{r_F} \sin \omega_h + \sqrt{1 - \left(\frac{v_{px,x}^2}{r_F^2} + \frac{v_{px,y}^2}{r_F^2} \right)} \sin \omega_v \cos \omega_h} \right). \quad (\text{A.14})$$

Wenn der Öffnungswinkel des Sichtfelds der Kugelobjektive 2α beträgt, $N_{px,x}$ die Anzahl der Pixel in x-Richtung auf dem Kamerachip ist und n_x die Pixelposition angibt, dann gilt:

$$\sin \alpha = \frac{\frac{v_{px,x}}{r_F} \cdot \frac{N_{px,x}}{2}}{n_x} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{v_{px,x}}{r_F} = 2 \cdot \sin \alpha \frac{n_x}{N_{px,x}}; \quad (\text{A.15})$$

und analog für die y-Richtung:

$$\frac{v_{px,y}}{r_F} = 2 \cdot \sin \alpha \frac{n_y}{N_{px,y}}. \quad (\text{A.16})$$

Damit werden aus den Gleichungen (A.11) und (A.14) schließlich die Ausdrücke

$$\vartheta = \arccos \left(\sqrt{1 - 4 \sin^2 \alpha \cdot \left(\frac{n_x^2}{N_{px,x}^2} + \frac{n_y^2}{N_{px,y}^2} \right)} \cdot \cos \omega_v - 2 \sin \alpha \cdot \frac{n_x}{N_{px,x}} \cdot \sin \omega_v \right) \quad (\text{A.17})$$

und

$$\varphi = \arctan \left(\frac{2 \sin \alpha \cdot \frac{n_x}{N_{px,x}} \cdot \cos \omega_v \sin \omega_h + 2 \sin \alpha \cdot \frac{n_y}{N_{px,y}} \cdot \cos \omega_h + \sqrt{1 - 4 \sin^2 \alpha \cdot \left(\frac{n_x^2}{N_{px,x}^2} + \frac{n_y^2}{N_{px,y}^2} \right)} \cdot \sin \omega_v \sin \omega_h}{2 \sin \alpha \cdot \frac{n_x}{N_{px,x}} \cdot \cos \omega_v \cos \omega_h - 2 \sin \alpha \cdot \frac{n_y}{N_{px,y}} \cdot \sin \omega_h + \sqrt{1 - 4 \sin^2 \alpha \cdot \left(\frac{n_x^2}{N_{px,x}^2} + \frac{n_y^2}{N_{px,y}^2} \right)} \cdot \sin \omega_v \cos \omega_h} \right) + \kappa. \quad (\text{A.18})$$

Der zusätzlich eingeführte Parameter κ erweitert den Wertebereich von φ auf das Intervall $[0; 2\pi[$ (vgl. Tabelle 3.1).

A.3 Temperatureausdehnungskoeffizient von ^{28}Si

Die Isotopenzusammensetzung von natürlichem Silizium besteht zu 92,2 % aus ^{28}Si , zu 4,7 % aus ^{29}Si und zu 3,1 % aus ^{30}Si . Beim Siliziumkristall aus hochangereichertem ^{28}Si , der mit Ultrazentrifugen in Russland hergestellt wurde [69], überwiegt mit rund 99,99 % der Anteil von ^{28}Si . Da in [51] ein unterschiedliches Verhalten der thermischen Ausdehnung für die verschiedenen Isotope von Silizium theoretisch vorhergesagt wurde und die thermische Ausdehnung bei der Durchmesserbestimmung der Siliziumkugeln des Avogadro-Projekts eine Rolle spielt, wurden Messungen durchgeführt, um den Temperatureausdehnungskoeffizienten des angereicherten Materials zu ermitteln. Zwei unabhängige experimentelle Herangehensweisen wurden dazu verwendet [52]: Einerseits temperaturabhängige Längenmessungen des Durchmessers von makroskopischen Siliziumkugeln aus ^{28}Si mit dem Kugelinterferometer der PTB und andererseits Messungen der temperaturabhängigen Änderungen der Gitterkonstanten eines Einkristalls aus dem angereicherten Material auf mikroskopischer Ebene. Im Folgenden werden Vorgehensweise und Ergebnisse der zuerst genannten Methode grob erläutert. Eine detaillierte Beschreibung beider Experimente und deren Vergleich ist in [52] zu finden.

Für die temperaturabhängigen Längenmessungen wurden die zwei Kugeln *Avo28-S5* und *Avo28-S8* aus ^{28}Si als Messobjekte verwendet. Jede der Kugeln wurde so orientiert, dass sich im Sichtfeld der Interferometerobjektive ein Topografieausschnitt mit leichter Steigung befand. Die Ausschnitte sind in den Abbildungen 4.1(b) und 4.1(c) auf Seite 41 dargestellt.

Bei unterschiedlichen Temperaturen mit einer Abweichung von höchstens einigen Millikelvin wurden jeweils Serien von Durchmessermessungen durchgeführt, wobei jede Serie aus vier bis elf Einzelmessungen besteht und jede Einzelmessung wegen der Anzahl der belichteten Kamerapixel 9856 Messwerte liefert. Die Auswertung der Interferogramme erfolgte gemäß der in den Abschnitten 2.2 und 3.3 beschriebenen Methode, so dass sich 9856 Längenwerte ergeben. Die Zieltemperaturen im Intervall zwischen 17,5 °C und 30,0 °C wurden mit einem Thermostat eingestellt, wobei wegen der thermischen Trägheit des Interferometeraufbaus nach jeder Umstellung ein Zeitraum von einigen Tagen abgewartet werden musste, bis sich erneut ein thermisches Gleichgewicht eingestellt hatte.

Der Temperatureausdehnungskoeffizient α ist nach [101] definiert als

$$\alpha = \frac{1}{L} \cdot \frac{dL}{dT}, \quad (\text{A.19})$$

wobei L eine Länge als Funktion der Temperatur (in Kelvin) ist. Um eine kontinuierliche Beschreibung der Länge aus einzelnen, bei bestimmten Temperaturen gemessenen Längenwerten zu erhalten, kann ein „Least squares“-Fit verwendet werden.

Aus den Fitparametern lassen sich die Koeffizienten $\alpha_{0,28}$ und $\alpha_{1,28}$ ermitteln, die für die Darstellung des Temperatúrausdehnungskoeffizienten und bei der Durchmesserauswertung für die Temperaturkorrektur auf 20 °C (vgl. Abschnitt 3.3) benötigt werden:

$$\alpha_{0,28} = 2,5530 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1} \quad \text{und} \quad \alpha_{1,28} = 4,32 \cdot 10^{-9} \text{ K}^{-2}. \quad (\text{A.20})$$

Eine nach [102] durchgeführte Unsicherheitsbetrachtung liefert $u(\alpha_{0,28}) = 0,0012 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ und $u(\alpha_{1,28}) = 0,37 \cdot 10^{-9} \text{ K}^{-2}$.

A.4 Nebenrechnung zu Abschnitt 5.2.1

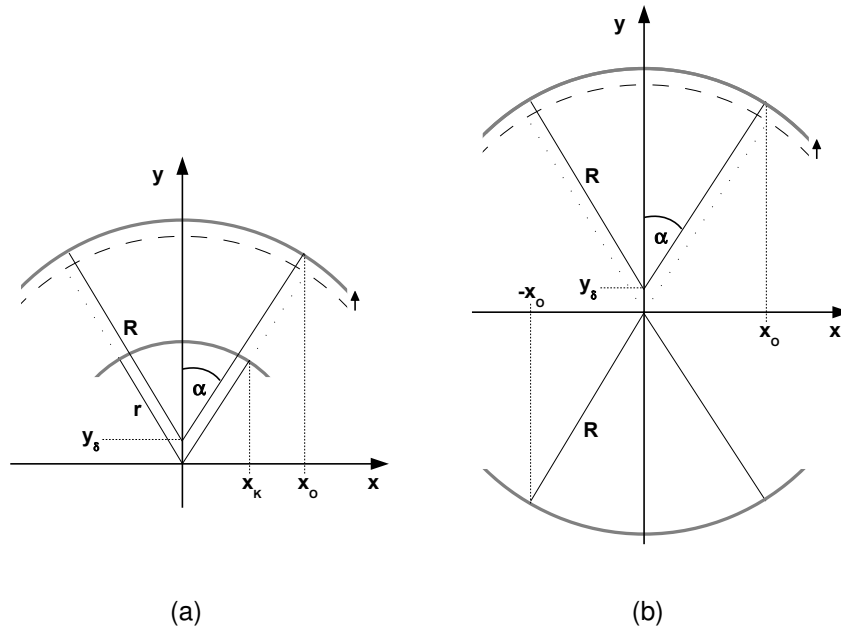


Abbildung A.1: Skizze zur Nebenrechnung

Zwei konzentrisch angeordnete sphärische Flächen (z. B. Kugeloberfläche und Objektiv-Referenzfläche)

$$f_O(x) = \sqrt{R^2 - x^2} \quad \text{und} \quad (\text{A.21})$$

$$f_K(x) = \sqrt{r^2 - x^2} \quad (\text{A.22})$$

mit unterschiedlichen Krümmungsradien haben radial betrachtet für alle Feldwinkel

$$\alpha = \arcsin\left(\frac{x_O}{R}\right) = \arcsin\left(\frac{x_K}{r}\right) \quad (\text{A.23})$$

den selben Abstand zueinander. Abbildung A.1(a) zeigt den Fall, dass eine der Sphären entlang der eingezeichneten y-Achse um y_δ verschoben ist. Neben einem Offset von y_δ bei $\alpha = 0$ führt diese Verschiebung zu einem vom Feldwinkel abhängigen radialen Abstand $\Delta_{rR}(\alpha)$. Wie die Rechnung zeigt, folgt diese Abhängigkeit in Näherung zweiter Ordnung einem quadratischen Verlauf. Zunächst erhält man:

$$\Delta_{rR}(\alpha) = \sqrt{[(f_O(x_O) + y_\delta) - f_K(x_K)]^2 + (x_O - x_K)^2} \quad (\text{A.24})$$

$$= \sqrt{\left(\sqrt{R^2 - x_O^2} + y_\delta - \sqrt{r^2 - x_K^2}\right)^2 + (x_O - x_K)^2} \quad (\text{A.25})$$

$$= \sqrt{\left(\sqrt{R^2 - R^2 \sin^2 \alpha} + y_\delta - r \cos \alpha\right)^2 + (R \sin \alpha - r \sin \alpha)^2} \quad (\text{A.26})$$

$$= \sqrt{(R \cos \alpha + y_\delta - r \cos \alpha)^2 + (R - r)^2 \sin^2 \alpha} \quad (\text{A.27})$$

$$= \sqrt{((R - r) \cos \alpha + y_\delta)^2 + (R - r)^2 \sin^2 \alpha} \quad (\text{A.28})$$

$$= \sqrt{(R - r)^2 \cos^2 \alpha + 2(R - r)y_\delta \cos \alpha + y_\delta^2 + (R - r)^2 \sin^2 \alpha} \quad (\text{A.29})$$

$$= (R - r) \sqrt{\cos^2 \alpha + 2 \frac{y_\delta}{R - r} \cos \alpha + \frac{y_\delta^2}{(R - r)^2} + \sin^2 \alpha} \quad (\text{A.30})$$

$$= (R - r) \sqrt{1 + 2 \frac{y_\delta}{R - r} \cos \alpha + \frac{y_\delta^2}{(R - r)^2}}. \quad (\text{A.31})$$

Wegen $y_\delta \ll R - r$ folgt aus der Entwicklung der Wurzel bis zu Termen zweiter Ordnung:

$$\Delta_{rR}(\alpha) \approx (R - r) \left[1 + \frac{y_\delta}{R - r} \cos \alpha + \frac{y_\delta^2}{2(R - r)^2} - \frac{4}{8} \cos^2 \alpha \frac{y_\delta^2}{(R - r)^2} \right] \quad (\text{A.32})$$

$$= (R - r) + y_\delta \cos \alpha + \frac{1}{2} \frac{y_\delta^2}{R - r} (1 - \cos^2 \alpha) \quad (\text{A.33})$$

$$= (R - r) + y_\delta \cos \alpha + \frac{1}{2} \frac{y_\delta^2}{R - r} \sin^2 \alpha. \quad (\text{A.34})$$

Analog dazu erhält man nach Abbildung A.1(b) für zwei sich gegenüber liegende sphärische Flächen (z. B. die Objektiv-Referenzflächen) ebenfalls einen quadratischen Verlauf.

Zunächst wieder einige Umformungen:

$$\Delta_{RR}(\alpha) = \sqrt{[(f_O(x_O) + y_\delta) - (-f_O(-x_O))]^2 + (x_O - (-x_O))^2} \quad (\text{A.35})$$

$$= \sqrt{\left(2\sqrt{R^2 - x_O^2} + y_\delta\right)^2 + (2x_O)^2} \quad (\text{A.36})$$

$$= \sqrt{\left(2\sqrt{R^2 - R^2 \sin^2 \alpha} + y_\delta\right)^2 + (2R \sin \alpha)^2} \quad (\text{A.37})$$

$$= \sqrt{(2R \cos \alpha + y_\delta)^2 + 4R^2 \sin^2 \alpha} \quad (\text{A.38})$$

$$= \sqrt{4R^2 \cos^2 \alpha + 4R y_\delta \cos \alpha + y_\delta^2 + 4R^2 \sin^2 \alpha} \quad (\text{A.39})$$

$$= 2R \sqrt{1 + \frac{y_\delta}{R} \cos \alpha + \frac{y_\delta^2}{4R^2}}. \quad (\text{A.40})$$

Wegen $y_\delta \ll 2R$ folgt aus der Entwicklung der Wurzel bis zu Termen zweiter Ordnung:

$$\Delta_{RR}(\alpha) \approx 2R \left[1 + \frac{y_\delta}{2R} \cos \alpha + \frac{y_\delta^2}{8R^2} - \frac{y_\delta^2}{8R^2} \cos^2 \alpha \right] \quad (\text{A.41})$$

$$= 2R + y_\delta \cos \alpha + \frac{1}{2} \frac{y_\delta^2}{2R} (1 - \cos^2 \alpha) \quad (\text{A.42})$$

$$= 2R + y_\delta \cos \alpha + \frac{1}{2} \frac{y_\delta^2}{2R} \sin^2 \alpha. \quad (\text{A.43})$$

Aus diesem Grund wird zur Berücksichtigung der axialen Verschiebung von Kugel und Referenzflächen neben Offset und Verkippung in zwei Richtungen zusätzlich ein parabolischer Anteil in das Modell einbezogen.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich all denen meinen Dank entgegen bringen, auf deren unterschiedlichst gestaltete Unterstützung ich während der Entstehung dieser Arbeit zählen konnte.

Prof. Dr. Andreas Hangleiter, Prof. Dr.-Ing. Rainer Tutsch und Prof. Dr. Peter Lemmens gebührt mein Dank für ihre Bereitschaft, sich für die Promotionskommission zur Verfügung zu stellen und hilfreiche Hinweise zur Verbesserung dieser Arbeit zu geben.

Besonders dankbar bin ich Dr. Arnold Nicolaus, durch den mir die Möglichkeit eröffnet wurde, an einem ebenso spannenden wie fordernden Experiment mitzuwirken, und dessen Rat mir immer wieder Orientierung gab. Zusammen mit ihm und Andreas Peter waren selbst die wochenlangen Messzeiten im finsternen Labor angenehm zu verbringen und nicht selten sogar sehr amüsant.

Dr. Michael Krystek danke ich dafür, dass er mich in allen Belangen der numerisch-mathematischen Stolperfallen äußerst engagiert beraten hat und in kürzester Zeit einen angepassten QR-Algorithmus bereitstellen konnte. Mein Dank gilt ebenso Axel Wiegmann für die zahlreichen Gespräche und Fachsimpelien über die Grundlagen und Probleme der Stitching-Verfahren und Walter Giardini vom NMI-A für die Daten der Rundheitsmessungen.

Meinen weiteren Dank bringe ich all denen entgegen, die hilfreiche Anmerkungen zur Verbesserung dieser Arbeit machten, und selbstverständlich meinen Kollegen in der PTB, die stets hilfsbereit mit angefasst haben und ein besonders angenehmes Arbeitsumfeld boten.

Zu guter Letzt, aber nicht minder wichtig, danke ich Stephanie für ihre unbeschreibliche Geduld und das rege Interesse an meinem Schaffen. Ihr liebevoller Rückhalt war für mich während der arbeitsreichen Zeit von unschätzbarem Wert.

